

2



Gesellschaft für Anlagen-  
und Reaktorsicherheit  
(GRS) mbH

## Langzeitsicherheits- analysen für das End- lager Konrad

Bewertung der Modellrech-  
nungen des Antragstellers  
zur Grundwasserbewegung

Z. 85 (3. Ex.)



Gesellschaft für Anlagen-  
und Reaktorsicherheit  
(GRS) mbH

Langzeitsicherheitsanalysen für  
das Endlager Konrad

Bewertung der Modellrechnungen  
des Antragstellers zur  
Grundwasserbewegung



Februar 1990  
Auftrags-Nr.: 65 300

**Anmerkung:**

Dieser Bericht ist von der GRS im Auftrag des TÜV Hannover im Rahmen der Begutachtung Konrad erstellt worden. Der Auftraggeber behält sich alle Rechte vor. Insbesondere darf dieser Bericht nur mit seiner Zustimmung zitiert, ganz oder teilweise vervielfältigt werden bzw. Dritten zugänglich gemacht werden.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers wieder und muß nicht mit der Meinung des Auftraggebers übereinstimmen.

GRS - A - 2085



<b>1</b>	<b>Einleitung</b> .....	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Vorgehensweise des Antragsstellers</b> .....	<b>1</b>
2.1	Hydrogeologische Modelle .....	1
2.2	Berechnung der Grundwassertransportvorgänge in den hydro- geologischen Modellen .....	2
2.2.1	Physikalische Grundlagen und Randbedingungen .....	2
2.2.2	Übertragung des Schichtenmodells in das SWIFT-Rechenmodell .....	3
2.2.3	Ergebnisse der Modellrechnungen .....	3
2.2.4	Übertragung der hydrogeologischen Modelle in das FEM301-Re- chenmodell .....	5
2.2.5	Ergebnisse der FEM301-Rechnungen .....	6
2.2.5.1	Ergebnisse der Rechnungen zum Schichtenmodell .....	6
2.2.5.2	Ergebnisse der Rechnungen zum Störzonenmodell .....	7
<b>3</b>	<b>Bewertung des Rechencodes durch den Gutachter</b> .....	<b>8</b>
3.1	Stand der Verifizierung und Validierung des Rechencodes SWIFT .....	8
3.2	Stand der Verifizierung und Validierung des Rechencodes FEM301 ...	12
<b>4</b>	<b>Bewertung der Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung</b> ...	<b>13</b>
4.1	Bewertung der Rechnungen zum Schichtenmodell mit dem Code SWIFT .....	13
4.1.1	Bewertung der Übertragung des hydrogeologischen Modells in das Rechenmodell .....	13
4.1.2	Bewertung der Modellrechnungen .....	14
4.2.	Rechnungen mit dem Code FEM301 .....	15
4.2.1	Übertragung des hydrogeologischen Modells in das Rechenmodell FEM301 .....	16
4.2.2	Modellrechnungen mit FEM301 .....	16
4.3	Bewertung der Auswerteprogramme .....	17
<b>5</b>	<b>Das Rechenprogramm NAMMU des Gutachters</b> .....	<b>18</b>
5.1	Einleitende Beschreibung .....	18
5.2	Implementierte Grundgleichungen .....	18
5.3	Numerisches Lösungsverfahren .....	21
5.4	Ein- und AusgabeprozEDUREN .....	25
5.5	Qualitätsnachweis .....	28
<b>6</b>	<b>Anwendung des Codes NAMMU auf den Standort Konrad</b> .....	<b>32</b>
6.1	Hydrogeologisches Modell .....	32
6.2	Randbedingungen .....	33
6.3	Umsetzung in ein Rechengitter .....	33

6.3.1	2D-Modellgitter .....	34
6.3.2	3D-Modellgitter .....	35
<b>7</b>	<b>Ergebnisse der Grundwassertransportrechnungen .....</b>	<b>37</b>
7.1	Ergebnisse zum Basisfall (Variante 2) .....	37
7.2	Ermittlung von Laufzeiten und Laufwegen .....	40
7.3	Ergebnisse zur Modellvariante 1 (Unterkreideszenario) .....	42
<b>8</b>	<b>Zusammenfassende Bewertung .....</b>	<b>43</b>
<b>9</b>	<b>Literatur .....</b>	<b>47</b>

## **VERZEICHNIS DER TABELLEN**

**Tabelle 1:** Standarddatensatz der hydrogeologischen Einheiten und ihre Kennwerte im Basisfall und für die Variante 1 (Unterkreideszenario)

**Tabelle 2:** In TGSL verfügbare Grundtypen von Elementen



## **VERZEICHNIS DER BILDER**

- Bild 1: Ablaufschema zu NAMMU
- Bild 2: Gebiet des hydrogeologischen Modells
- Bild 3a, b: Aufbau von 2D-Modellgitterschnitten anhand von Netzfeldabschnitten
- Bild 4a: Geologischer Ost-West-Vertikalschnitt durch das Modellgebiet (Wiederergänzungsgebiet im Südteil)
- Bild 4b: Hydrogeologischer 2D-Modellgitterschnitt des Bildes 4a. NAMMU-Ergebnis der Netzgenerierung nach Zuordnung der hydrogeologischen Modelleinheiten
- Bild 4c: 2D-Finite Elementgitternetz des Vertikalschnittes im Bild 4a
- Bild 4d: Grundwasser-Potentialfeld als NAMMU-Ergebnis einer 2D-Simulation der hydrogeologischen Verhältnisse im Bild 4a
- Bild 5: 2D-Modellgitterschnitt (Ost-West-Richtung) durch das Wiederergänzungsgebiet im Süden
- Bild 6: 2D-Modellgitterschnitt (Ost-West-Richtung) durch den südlichen Bereich des Modellendlagers
- Bild 7: 2D-Modellgitterschnitt (Ost-West-Richtung) durch den nördlichen Bereich des Modellendlagers
- Bild 8: 2D-Modellgitterschnitt (Ost-West-Richtung) durch das Abflußgebiet im Norden des Modellgebietes
- Bild 9: Aufbau des 3D-Modellgitternetzes durch Zusammenfügen der 2D-Vertikalgitterschnitte



- Bild 10:** Nord-Süd-verlaufender Gitterebenschnitt entlang der Hauptmuldenachse durch das Modellgebiet zur Überprüfung der räumlichen Anbindung der mit NAMMU generierten 2D-Modellgitterschnitte
- Bild 11:** Nord-Süd-verlaufender Gitterebenschnitt östlich der Hauptmuldenachse zur Überprüfung der Anbindung der 2D-Modellgitterschnitte
- Bild 12a-c:** Topographie des Modellgitternetzes  
a) Quartär, b) Oxford, c) Oberer Muschelkalk
- Bild 13:** Umsetzung des hydrogeologischen Modells in das Rechenmodell: Nord-Süd-Schnitt "7"
- Bild 14:** Umsetzung des hydrogeologischen Modells in das Rechenmodell: Nord-Süd-Schnitt "8"
- Bild 15:** Vergleich der gemessenen und im Programm ermittelten Potentiallinien im Quartär
- Bild 16a-c:** Ost-West-Modellgitterschnitte durch das Wiederergänzungsgebiet im Süden: a) hydrogeologischer Modellschnitt, b) Grundwasser-Druckpotentialfeld und c) Darcy-Geschwindigkeitsvektorenfeld
- Bild 17 a-c:** Ost-West-Modellgitterschnitte im Bereich des Modellendlagers: a) hydrogeologischer Modellschnitt, b) Grundwasser-Druckpotentialfeld und c) Darcy-Geschwindigkeitsvektorenfeld
- Bild 18a-c:** Ost-West-Modellgitterschnitte durch das Gebiet des Grundwasser-Ausstroms im Norden: a) hydrogeologischer Modellschnitt, b) Grundwasser-Druckpotentialfeld und c) Darcy-Geschwindigkeitsvektorenfeld
- Bild 19a-c:** Nord-Süd-Modellgitterschnitte entlang des östlichen Modellrandes: a) hydrogeologischer Modellschnitt, b) Grundwasser-Druckpotentialfeld und c) Darcy-Geschwindigkeitsvektorenfeld
- Bild 20:** Nord-Süd-Modellgitterschnitt bei  $x = 5\ 000\ \text{m}$ : Grundwasser-Druckprofile

- Bild 21:** Nord-Süd-Modellgitterschnitt bei  $x = 6\,000$  m: Grundwasser-Druckprofile
- Bild 22:** Projektion der Modellgittertopographie, der Grundwasser-Isopotentiallinien und der DARCY-Geschwindigkeitsvektoren des Oxford auf die horizontale Ebene
- Bild 23a:** Trajektorienberechnung des Basisfalles: Seitenansicht auf das 3D-Modell
- Bild 23b:** Trajektorienberechnung des Basisfalles: Aufsicht auf das 3D-Modell
- Bild 24:** Trajektorienberechnung der Parametervariante Unterkreide: Seitenansicht des 3D-Modells.
- Bild 25:** Nord-Süd-Modellgitterschnitte: Druckprofil und Geschwindigkeitsfeld



## NOMENKLATUR:

2D, 3D zweidimensional, dreidimensional

FE Finite Elemente

## Lateinische Buchstaben:

a Koeffizient

C Konzentration

$c_H$  spezifische Wärmekapazität

$\bar{D}$  Dispersivität

$\bar{D}_h$  hydrodynamische Dispersivität

$D_m$  molekulare Diffusivität

f Funktion

$\bar{g}$  Gravitationsbeschleunigung

$\bar{I}$  Einheitstensor

$\bar{K}$  Permeabilität

n Porosität

$\bar{n}$  Normalenvektor

p Druck

$p_c$  Kapillardruck

Pe Peclet-Zahl

Q Quellterm

$R_D$	Retardationsfaktor
$S$	Sättigung
$T$	Temperatur
$t$	Zeit
$\bar{u}$	Feld der Lösungsvariablen
$\hat{u}$	Approximation der Lösungsvariablen
$\bar{v}$	Geschwindigkeit
$\bar{v}_D$	Darcygeschwindigkeit
$x, y, z$	Koordinaten

**Griechische Buchstaben:**

$\alpha_L$	longitudinale Dispersionslänge
$\alpha_T$	transversale Dispersionslänge
$\delta$	Kroneckerdelta
$\lambda$	Zerfallskonstante
$\mu$	Viskosität
$\rho$	Dichte
$\zeta, \eta, \xi$	lokale Koordinaten
$\alpha, \beta, \gamma$	Funktionen
$\Gamma$	Rand
$\phi, \chi$	Randbedingungen

**Indizes:**

F Fluid

H Energie

N Radionuklid

R Gestein

S Salz

W Wasser



## **1 Einleitung**

Die GRS wurde im Rahmen des Planfeststellungsverfahrens mit der Begutachtung der Langzeitsicherheitsanalysen zum Endlager Konrad beauftragt. Die Bewertung des diesen Analysen zugrundeliegenden hydrogeologischen Modells und der hydrogeologischen Daten wird vom Niedersächsischen Landesamt für Bodenforschung (NLfB) durchgeführt.

Im vorliegenden Bericht werden die Antragsunterlagen /PTB 89/ sowie begleitende Unterlagen wie z. B. /STO 86, STR 86/ begutachtet, die sich mit den Grundwassertransportrechnungen am Standort Konrad im Rahmen der Langzeitsicherheit befassen. Es werden die Rechenprogramme und ihre Anwendung auf den Standort Konrad einer Begutachtung unterzogen. Dabei wird die Umsetzung des hydrogeologischen Modells in ein Rechenmodell bewertet und die daraus resultierenden Konsequenzen für die Rechenergebnisse diskutiert. Weiterhin werden die Particle-Tracking-Verfahren zur Berechnung von Trajektorien in einem Grundwasserströmungsfeld einer Begutachtung unterzogen. Das vom Gutachter eingeführte Rechenprogramm NAMMU wird vorgestellt und mit Blick auf die Anwendung auf den Standort Konrad bewertet.

Es werden die Berechnungen von Antragsteller und Gutachter am Standort miteinander verglichen und einer Bewertung unterzogen. Abschließend werden die Aussagen des Antragstellers zu Grundwasserlaufwegen und Zeiten bewertet.

## **2 Vorgehensweise des Antragstellers**

### **2.1 Hydrogeologische Modelle**

Für eine potentielle langfristige Freisetzung von Radionukliden aus dem Endlager Konrad in die Biosphäre kommt in erster Linie das Grundwasser als Transportmedium in Frage. Für den Langzeitsicherheitsnachweis des Endlagers ist daher die Berechnung der Grundwasserbewegung am Endlagerstandort mit Hilfe von geohydraulischen Rechenmodellen von grundlegender Bedeutung. Aus dem Bearbeitungsgebiet am Standort Konrad wird ein Modellgebiet mit Daten und Randbedingungen zu einem



hydrogeologischen Modell herausgearbeitet und in ein numerisches (diskretisiertes) Modell umgesetzt.

Dem Plan zufolge bilden am Standort Konrad zwei Modellvarianten die Basis der Grundwassertransportrechnungen:

- das Schichtenmodell und
- das Störzonenmodell.

Im Schichtenmodell werden Verwerfungen nur dann als hydraulisch wirksam angenommen, wenn bei Versätzen Grundwasserleiter miteinander in Berührung kommen oder gegen Aquitarden versetzt sind.

Im Störzonenmodell werden Zonen erhöhter Durchlässigkeiten in der Umgebung von Verwerfungen und an den Salzstockrändern angenommen. Weiterhin wird gegenüber dem Schichtenmodell das oberflächennahe Ausstreichen der Schichten Rhät und Oberer Muschelkalk im Bereich des Salzstockes Thiede berücksichtigt.

Beide Modelle unterscheiden sich weiterhin in den Daten und Parametern (hydraulische Durchlässigkeiten, Gebirgsdurchlässigkeiten) zur hydrogeologischen Beschreibung der Schichteinheiten.

## **2.2 Berechnung der Grundwassertransportvorgänge in den hydrogeologischen Modellen**

### **2.2.1 Physikalische Grundlagen und Randbedingungen**

Bei der Berechnung der Grundwasserhydraulik im Modellgebiet wird von der Gültigkeit des Fließgesetzes nach Darcy ausgegangen. Das Modellgebiet wird als bereichsweise homogenes poröses Medium behandelt.

Der Antriebsmechanismus für die Grundwasserbewegung insbesondere in tieferliegenden Schichten wird durch ein Grundwasserspiegelgefälle von ca. 140 m zwischen dem Salzgitter-Höhenzug und der Allerniederung geprägt.

Oberer Muschelkalk stellt die tiefste behandelte geologische Einheit dar. Die Modellbasis wird aufgrund des Salzes des Mittleren Muschelkalkes sowie der Tonsteine im Liegenden als undurchlässig angenommen.

Der Salzgitter-Höhenzug im Süden, die Allerniederung bzw. der Calberlah-Graben im Norden, die Salzstockketten im Osten und Westen bilden die Modellgrenzen und wurden in den Berechnungen als undurchlässige Berandungen behandelt.

Die Randbedingungen wurden als stationär angenommen, jahreszeitliche Schwankungen oder langfristige hydrologische Veränderungen wurden nicht unterstellt.

### **2.2.2 Übertragung des Schichtenmodells in das SWIFT-Rechenmodell**

Die Grundwasserbewegung im hydrogeologischen Schichtenmodell wurde mit dem Code SWIFT behandelt. SWIFT ist ein Finite-Differenzen-Code, der die Grundwasser- und Nuklidtransportvorgänge in einem Modellgebiet dreidimensional berechnen kann. Dazu benötigt der Code die Unterteilung des Modellgebietes in ein orthogonales Gitter, d. h. das Modellgebiet Konrad muß als Quader abgebildet werden. Aus diesem Grund wurde das Nordgebiet des Modells aus seiner nord-östlichen Richtung in eine Nordrichtung gedreht und somit verzerrt. Für die Berechnung ist das Modellgebiet in ein Raster von orthogonalen Blöcken aufgeteilt worden. Diese Diskretisierung erfolgte derart, daß die Schichteinheiten (Tabelle 1) des hydrogeologischen Modells nachgebildet wurden. Dabei wurden 30 Ost-West-Schnitte des Modellgebietes diskretisiert und mittels 10 350 Blöcken zu einem 3D-Modell zusammengestellt. Die Vorgehensweise bei der Übertragung des hydrogeologischen Modells in das diskrete Rechengitter sowie die daraus resultierende notwendige Anpassung der Eingabedaten an das Rechenmodell wurde ausführlich in der Unterlage des Antragstellers /STO 86/ sowie im Sachstandsbericht des Gutachters /BAL 88/ dargestellt und diskutiert.

### **2.2.3 Ergebnisse der Modellrechnungen**

Primäres Ergebnis der Grundwassertransportrechnungen ist die räumliche Druckverteilung im Modellgebiet in den Mittelpunkten der diskreten Blöcke des Rechenmodells. Aus dieser werden die Darcy-Geschwindigkeiten und unter Einbeziehung der

effektiven Porositäten die Abstandsgeschwindigkeiten auf den Flächenmittelpunkten der Blöcke ermittelt.

Die tieferliegenden Schichten des Modellgebietes werden im wesentlichen über den Salzgitter-Höhenzug mit Grundwasser gespeist. Die Grundwasserströmung in den tieferliegenden Aquiferen ist im südlichen Einstromgebiet von West nach Ost und ansonsten im Modellgebiet von Süd nach Nord gerichtet. Der Hilssandstein mit seiner hohen hydraulischen Leitfähigkeit beeinflusst aufgrund seines relativ hohen Druckpotentials im Bereich des Konradgrabens die Grundwasserströmung in der Umgebung des Endlagers. Ein Aufströmen des Grubenwassers im Konradgraben wird durch das Potential des Hilssandsteins behindert. Die Hauptströmungsrichtung in der Endlagerformation Oxford sowie in den Aquiferen des Systems ist weitgehend schichtparallel.

Mit Hilfe von Auswerteprogrammen (Particle-Tracking-Verfahren) werden Stromlinien ermittelt und als potentielle Freisetzungswegen von Radionukliden aus dem Endlager durch die Geosphäre interpretiert. Gleichzeitig wird die Laufzeit der Wasserpartikel vom Startpunkt, z. B. dem Endlager, bis hin zum Austrittspunkt, z. B. dem Quartär, entlang der Stromlinie ermittelt.

Aus einer Reihe von Parametervariationen heben sich zwei Varianten mit unterschiedlich angesetzten hydraulischen Leitfähigkeiten für die Unterkreidetone bzgl. der Grundwasserlaufzeiten und Fließwege vom Endlager bis hin zur Biosphäre besonders hervor. Bei der Variante 1 wird für die Unterkreidetone ein Durchlässigkeitswert von  $1 \cdot 10^{-10} \text{m/s}$  angesetzt, bei der Variante 2 für das gleiche Material ein Wert von  $1 \cdot 10^{-12} \text{m/s}$ .

#### Variante 1:

Bei der Variante 1 stellt sich aufgrund der gegenüber Variante 2 größeren Leitfähigkeit der Unterkreidetone eine stärkere Vertikalkomponente der Darcy-Geschwindigkeiten sowohl in den Tonen als auch in den Aquiferen, z. B. dem Oxford, ein. Alle Partikel verlassen das Oxford und werden nahezu vertikal durch die Tone ins Quartär transportiert. Die kürzeste Wasserlaufzeit beträgt 430 000 Jahre.

Variante 2:

Demgegenüber zeigen die Rechnungen zur Variante 2 eine kleinere Vertikalkomponente der Darcy-Geschwindigkeiten, insbesondere im Lagerbereich und lagernahen Abstrombereich. Als ein Freisetzungsweg wird die Strömung im Oxford mit Austritt in Calberlah ermittelt.

Die kürzeste Wasserlaufzeit beträgt dabei ca. 300 000 Jahre.

Die Bilanzierung des Durchflusses durch das Grubengebäude ergibt:

Variante 1: 3 200 m<sup>3</sup>/a

Variante 2: 1 600 m<sup>3</sup>/a

#### **2.2.4 Übertragung der hydrogeologischen Modelle in das FEM301-Rechenmodell**

Zur Berechnung der Grundwasserströmung im Störzonenmodell hat der Antragsteller das Finite-Elemente-Programm FEM301 mit dem Ziel eingesetzt, an definierten Testbeispielen den Stand von Wissenschaft und Technik in der Modellierung der Grundwasserströmung festzustellen, die Rechenprogramme zu verifizieren und die Methoden der Modellkalibrierung und -validierung zu verfeinern.

Das Modellgebiet entspricht dem des Schichtenmodells. Im Störzonenmodell wurden Zonen erhöhter Durchlässigkeiten in der Umgebung von Verwerfungen und an den Salzstockrändern angenommen. Weiterhin wurde gegenüber dem Schichtenmodell das oberflächennahe Ausstreichen der Schichten Rhät und Oberer Muschelkalk im Bereich des Salzstockes Thiede berücksichtigt. Darüber hinaus sind die Schichten der Tonsteine des Keuper, des Lias und des Dogger anisotrop behandelt sowie die Unterkreide in zwei Schichtbereichen (Alb und Apt, Barrême, Hauterive) modelliert worden.

Da gegenüber SWIFT der Zwang zu orthogonalen Elementen bei der FE-Methode entfällt, lassen sich geologische Strukturen mit diesem Verfahren leichter modellieren. Das Modellgebiet wurde in Finite Elemente unterteilt, die in Elementsäulen angeordnet sind. Diese reichen vom Modellboden bis zur Modelloberfläche. Das Modellgebiet wurde mit ca. 6 000 Elementen (21 000 Knoten) modelliert. Störungen und Störzonen sowie das Endlager wurden beim Modellaufbau berücksichtigt. In hydraulisch

besonders wirksamen Bereichen bzw. in Bereichen mit komplexen Geometrien wurde die Diskretisierung verfeinert (z. B. Konradgraben, Grubengebäude, Salzgitter-Höhenzug).

Das Grubengebäude ist als dreidimensionaler Körper mit erhöhter hydraulischer Leitfähigkeit abgebildet, die Nordstrecke ist durch eindimensionale Elemente dargestellt worden.

Die Randbedingungen des Rechenmodells entsprechen denen des Schichtenmodells. In Parameterrechnungen sind die Randbedingungen variiert worden, z. B. Annahme einer Flußrandbedingung für die tiefliegenden Wasserleiter Rhät und Oberer Muschelkalk am Ost- und Südrand des Modellgebietes.

Ergebnisse der Rechnungen sind hier ebenfalls die räumliche Druckverteilung, aus der die Darcy-Geschwindigkeiten und die Abstandsgeschwindigkeiten ermittelt wurden.

Stromlinien, die als Freisetzungswege von Radionukliden im Modell interpretiert wurden, sowie Laufzeiten entlang dieser Stromlinien sind (ähnlich dem Berechnungsfall SWIFT) mit Hilfe von Particle-Tracking Methoden ermittelt worden.

## **2.2.5 Ergebnisse der FEM301-Rechnungen**

### **2.2.5.1 Ergebnisse der Rechnungen zum Schichtenmodell**

In diesen Rechnungen (Rechenfälle R02 und R03) blieben die Störzonen unberücksichtigt. Die Schichten des Modellgebietes wurden dem Schichtenmodell entsprechend mit hydrogeologischen Daten belegt.

Variante 1 (Rechenfall R02):

Die Auswertung dieser Rechnung liefert Stromlinienverläufe, die nach einem mehr oder weniger langen Verlauf in Süd-Nord-Richtung vertikal durch die Deckschichten zur Modelloberfläche aufsteigen. Von 17 Stromlinien, die das Quartär erreichen, weisen fünf keinen nennenswerten Horizontaltransport aus. Mit einer Ausnahme, die

entlang des Salzstockes Broistedt verläuft, erreichen die restlichen Stromlinien das Quartär im Abstrom der Grube vor der Überschiebung von Meine.

Die kürzeste Laufzeit entlang solcher Stromlinien beträgt ca. 330 000 Jahre.

Im Oxford werden Abstandsgeschwindigkeiten zwischen 0.1 m/a ./ 0.4 m/a ermittelt. Diese liegen somit in der gleichen Größenordnung wie die in den SWIFT-Rechnungen ermittelten.

Variante 2 (Rechenfall R03):

Aufgrund der geringeren Leitfähigkeit der Unterkreide und des Alb wird in den Berechnungen der Vertikalstrom durch die Deckschichten stark erschwert. Die Auswertung der Rechnung weist für die meisten Stromlinien eine nach Norden gerichtete Strömung aus. Die Austrittspunkte der meisten Stromlinien liegen nördlich der Überschiebung von Meine. Einige Stromlinien steigen ins Hangende des Oxford auf, andere tauchen in den Cornbrash oder auch Rhät ab und laufen ein Stück weit nach Norden. Einige Stromlinien folgen dem Rhät und treten bei Thiede ins Quartär über. Die im nördlichen Gebiet auftauchenden Stromlinien enden in der Gegend von Calberlah. Sie verlaufen im Gegensatz zu den SWIFT-Rechnungen nicht ausschließlich im Oxford, sondern treten auf ihrem Weg in die Schichten Kimmeridge und Unterkreide über. Die kürzeste Laufzeit beträgt ca. 6.3 Mio. Jahre.

Die Durchflüsse durch das Grubengebäude werden für die Varianten wie folgt errechnet:

Variante 1      2 840 m<sup>3</sup>/a

Variante 2      1 050 m<sup>3</sup>/a

#### **2.2.5.2 Ergebnisse der Rechnungen zum Störzonenmodell**

In diesen Rechnungen (Referenzfall R01) wurden die hydraulischen Gebirgsdurchlässigkeiten der Schichten gegenüber dem Schichtenmodell mit veränderten Werten belegt /PTB 89/. Für die Störzonen sind je nach tektonischer Beanspruchung erhöhte Leitfähigkeiten angesetzt worden.

Die Leitfähigkeiten für Hils, Rhät und Oberer Muschelkalk wurden anhand der realistischen Grundwasserneubildungsrate am Salzgitter-Höhenzug überprüft.

Die in den Rechnungen ermittelten Potentialverteilungen zeigen im Süden des Modellgebietes ein erhöhtes Potential in den Wasserleitern Hils, Rhät und Oberer Muschelkalk gegenüber dem Oxford. Das Oxford wird im wesentlichen durch Zuflüsse aus dem Hils; der Cornbrash durch Zuflüsse aus dem Rhät und der Unterkreide gespeist. Nördlich der Grube weist das Oxford das höhere Potential auf und gibt Wasser ins Hangende und Liegende ab. Die Hauptabstromrichtung des Wassers im Oxford ist nordwärts gerichtet. Die Auswertung der Rechnung mittels Particle-Tracking-Methoden liefert Stromlinien, die sich in zwei Hauptgruppen unterteilen lassen. Die erste Gruppe ist gekennzeichnet durch eine geringe nordwärts gerichtete Strömung und einen vertikalen Aufstieg durch die Deckschichten. Die zweite Gruppe weist eine ausgeprägte Nordkomponente auf, die bis hinter die Überschiebung von Meine reicht.

Die ermittelten Wasserlaufzeiten sind größer als 700 000 Jahre. Der Durchfluß durch das Grubengebäude errechnet sich zu 630 m<sup>3</sup>/a.

### **3 Bewertung des Rechencodes durch den Gutachter**

#### **3.1 Stand der Verifizierung und Validierung des Rechencodes SWIFT**

Rechenmodelle zur Beurteilung der Langzeitsicherheit von Endlagern für radioaktive Abfälle beschreiben die Strömung des Grundwassers sowie die Transportvorgänge mit dem Grundwasser. Angesichts der Bedeutung, die den Rechenmodellen bei dem Nachweis der Langzeitsicherheit zukommt, ist es erforderlich aufzuzeigen,

- daß das Gleichungssystem, welches die Vorgänge beschreibt, richtig implementiert ist und ausreichend genau gelöst wird (Verifizierung),
- daß die verwendeten Gleichungen bzw. die ihnen zugrundeliegenden Annahmen die Natur ausreichend genau beschreiben (Validierung).

Entsprechende Studien sind in den vergangenen Jahren auf Anregung der schwedischen Genehmigungsbehörde SKI für Radionuklidtransportmodelle (INTRACOIN) und

für Grundwasserströmungsmodelle (HYDROCOIN) durchgeführt worden. Diese Projekte wurden in drei Teilen abgewickelt:

- Level 1 Verifizierung
- Level 2 Validierung
- Level 3 Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse.

Die TU Berlin und später GSF haben an diesen Studien mit dem Rechenprogramm SWIFT teilgenommen. Daneben beteiligten sich noch andere Organisationen mit unterschiedlichen Programmen, aber auch mit weiteren SWIFT-Versionen, an diesen Studien. In den folgenden Ausführungen wird unterschieden zwischen allgemeinen Aussagen, die für alle SWIFT-Versionen zutreffen und solchen, die nur für die im Verfahren Konrad eingesetzte Version gelten. Letztere wird zur Abgrenzung mit SWIFT-TUB gekennzeichnet.

Aufgrund der Abschlußberichte von INTRACOIN hat die GRS eine Bewertung der mit SWIFT erzielten Ergebnisse vorgenommen /BOG 87/.

Als Schlußfolgerungen wurden festgehalten, daß die Verifikation für eindimensionale Beispiele für SWIFT-TUB erfolgreich war. Eine Validierung scheiterte in INTRACOIN daran, daß bei der Nachrechnung von Experimenten keine unabhängigen Bewertungsmaßstäbe vorlagen. Sensitivitätsanalysen, die für Konrad repräsentativ wären, wurden nicht durchgeführt.

Im gleichen Bericht wurde auch die im Rahmen von HYDROCOIN für Grundwassermodelle durchgeführte Verifikation auf der Grundlage des Entwurfs des Ergebnisberichtes bewertet. Durch die Veröffentlichung des endgültigen Abschlußberichtes zu HYDROCOIN Level 1 kamen keine wesentlich neuen Erkenntnisse hinzu. So gilt, daß sich die SWIFT-Ergebnisse in den allgemeinen Rahmen gut einordnen. Allerdings ist zu beachten, daß die Streubänder bei HYDROCOIN größer sind als bei INTRACOIN. Dies ist nicht so ausgeprägt bei skalaren Größen wie den errechneten Drücken, aber vektorielle Größen, wie die Geschwindigkeiten, zeigen größere Differenzen. Am stärksten sind die Abweichungen bei den Trajektorien. Dies macht sich insbesondere bei komplexeren geologischen Strukturen bemerkbar. Als Ursache wurde vermutet, daß die Probleme nicht bei den hydrogeologischen Rechencodes, sondern bei den Postprozessoren liegen.



Neben diesen Problemen mit Particle-Tracking-Verfahren treten auch größere Divergenzen bei extrem nichtlinearen Phänomenen auf wie dem Transport von Laugen und dessen Rückkopplung auf das Strömungsfeld über Dichteeinflüsse.

Die Relevanz der untersuchten Beispiele für eine Konradanwendung ist nicht in allen Fällen des Levels 1 gegeben. SWIFT-TUB hat nur an einem der relevanten Beispiele teilgenommen, nämlich an der Ermittlung der Grundwasserströmung in einem Gebiet mit großen Permeabilitätsunterschieden (Case 7). In diesem Fall gab es allerdings noch spezielle Probleme mit den Randbedingungen, welche dazu führten, daß die Particle-Tracking-Verfahren teilweise falsche Ergebnisse lieferten. So kann die Bewertung der Verifikation von SWIFT-TUB nur dahin vorgenommen werden, daß dessen Ergebnisse bezüglich skalarer und auch vektorieller Größen im Band der Ergebnisse der anderen Rechenprogramme liegt. Ansonsten läßt sich auch aus diesem Fall hinsichtlich der Trajektorien kein einheitliches Bild gewinnen.

Die Trajektorien stellen die Kopplungsstelle zwischen der mehrdimensionalen Grundwasserrechnung und der eindimensionalen Radionuklidtransportrechnung dar. Daher haben sie für die Langzeitsicherheitsanalyse große Bedeutung. Wegen der unbefriedigenden Situation der Verifikation hat man diesem Problem im Level 3 größere Aufmerksamkeit geschenkt. Später wird darauf noch eingegangen werden.

In beiden anderen Fällen, an denen SWIFT-TUB teilgenommen hat, nämlich die Ermittlung der Strömung in einem idealisierten Kluftwasserleiter in der unmittelbaren Umgebung eines Brunnens sowie die Modellierung des Laugentransportes, haben für das Verfahren Konrad keine Relevanz.

Für den Level 2 liegt inzwischen der Berichtsentwurf zur Validierung vor. Von den fünf definierten Rechenbeispielen ist nur ein einziger Fall relevant für die geologischen Verhältnisse in Konrad, nämlich ein großräumiges Grundwassermodell (80 km x 80 km x 2500 m) in anisotropen geringpermeablen Tongesteinen (Case 4). Es sollte aufgezeigt werden, daß eine solche hydrogeologische Situation auch aufgrund eines relativ geringen geologischen Kenntnisstandes modelliert werden kann. Die Daten stammen aus etwa 50 Pegelbohrungen, von denen einige zusätzlich hydraulisch getestet wurden, sowie Angaben über natürliche Quellen und Grundwasserneubildungsraten. Der Zweck war, durch Schätzung der hydrogeologischen Parameter mit Hilfe von geostatistischen Methoden, die Grundwasserstände an die gemessenen Werte

anzugleichen. Vier Rechenprogramme haben sich mit diesem Fall auseinandergesetzt, darunter war allerdings keine SWIFT-Version. Die Ergebnisse zeigen, daß die Übereinstimmungen zwischen Rechnung und Feldbeobachtung relativ gut sind. Die maximale Abweichung wurde mit 8 m erreicht. Allerdings ist dieser Fall keine tatsächliche Validierung, da der Vergleich mit unabhängigen Daten fehlt; die gemessenen Werte wurden benutzt um die optimale Kalibrierung des Modells durchzuführen. Eine genauere Auswertung dieses Falles kann dann erfolgen, wenn neben dem Ergebnisbericht auch Einzelberichte der Projektgruppen vorliegen.

Die TU Berlin hat sich mit SWIFT-TUB an einer Nachrechnung eines Experimentes beteiligt. Dieses Beispiel ist jedoch nur relevant als Analogon zum Laugentransport in der Umgebung eines Salzstockes. Aber auch dieser Fall ist keine Validierung, da exakte Meßdaten fehlen und nur qualitative Vergleiche durchgeführt werden konnten.

Als derzeitige vorläufige Bewertung läßt sich aussagen, daß das Grundwassermodell SWIFT-TUB im Rahmen von HYDROCOIN nicht validiert ist.

Zu Level 3 gibt es einen ersten Entwurf eines Abschlußberichtes, der allerdings noch keine Zusammenfassung der Ergebnisse enthält. Als eines der relevanten Ergebnisse läßt sich an Hand der Diskussion in den im Rahmen des Projektes veranstalteten Workshops ableiten, daß die Particle-Tracking-Verfahren nicht optimal sind und unter bestimmten Bedingungen falsche Ergebnisse liefern. Im Level 1 HYDROCOIN wurde festgestellt, daß hydrogeologische Rechenprogramme eine relativ gute Übereinstimmung in der Druckverteilung erreichen, während Trajektorien z. T. sehr große Abweichungen zeigen. Eine Vermutung hierfür war, daß nicht die hydrogeologischen Rechenprogramme sondern die Postprozessoren diese Unterschiede verursachten.

Zusammenfassend läßt sich sagen:

- Die Verifikation des Codes SWIFT ist für eindimensionale Nuklidtransportrechnungen im Rahmen von INTRACOIN erfolgreich verlaufen.
- Eine Validierung konnte nicht vorgenommen werden.
- Für die Grundwasserrechnungen ist SWIFT im Vergleich zu den internationalen Codes und bezüglich der behandelten HYDROCOIN-Fälle als verifiziert anzusehen. Bezüglich der komplexen Hydrogeologie am Standort Konrad sind Defizite vorhanden. Ein Konrad relevanter Fall wäre Fall 6 gewesen.
- SWIFT kann nicht als validiert angesehen werden.

### **3.2 Stand der Verifizierung und Validierung des Rechencodes FEM301**

FEM301 ist ein FE-Code zur Berechnung von Grundwasserströmungsfeldern; er beinhaltet nicht die Möglichkeit der Berechnung von Radionuklidtransportvorgängen im Grundwasser. Zur Verifizierung im Rahmen von HYDROCOIN wurde er von der Universität von Neuchatel und von Motor Columbus bzw. der Eidgenössischen Technischen Hochschule Zürich im Level 2 eingesetzt.

Im Level 1 /HYD 88/ wurden von FEM301 die Testfälle 2 (2D-Strömung in geklüftetem Granit) und 6 (großräumiges 3D-Modell mit großen Permeabilitätskontrasten) gerechnet, jedoch ohne den Einsatz eines Postprocessors. Da keine Pathlines berechnet wurden, stehen nur die Potentialfelder für einen Vergleich mit anderen Codes zur Verfügung. Der Vergleich der Druckverläufe längs spezifizierter Linien zeigt für beide Rechenfälle im Vergleich mit den anderen Programmen sehr gute Übereinstimmung. Allerdings muß man sich bei der Bewertung die allgemeine Schlußfolgerung von HYDROCOIN Level 1 vergegenwärtigen, daß es bezüglich skalarer Größen nur geringe Unterschiede gibt, während die Particle-Tracking-Verfahren, die das errechnete Potentialfeld weiterverarbeiten, sehr unterschiedliche Ergebnisse liefern. Insofern ist das Ergebnis der Verifizierung des Codes FEM301 ohne Postprocessor zu relativieren.

Zum Level 2 existiert z. Zt. lediglich ein Entwurf eines Ergebnisberichtes, die gedruckte Fassung soll im Frühjahr 1990 erscheinen. Hier hat Motor Columbus mit FEM301 den Fall 3 (Pumpversuch im geklüfteten Gneis) nachgerechnet. Verglichen wurden die Rechenergebnisse mit Absenkungskurven in Bohrlöchern in der Umgebung des

Brunnens. Die vorläufigen Ergebnisse zeigen eine zufriedenstellende Übereinstimmung der gerechneten mit den gemessenen Druckverläufen. Bezüglich des Standortes Konrad ist dieser Testfall allerdings von geringer Relevanz, zudem auch hier kein Postprocessor zum Einsatz kam.

Damit muß u. E. der Stand der Verifizierung des Codes FEM301 im Rahmen von HYDROCOIN im Hinblick auf den Einsatz am Standort Konrad als nicht ausreichend angesehen werden.

Verifizierungsrechnungen, die über die HYDROCOIN-Fälle hinaus gehen, liegen der GRS nicht vor. Sollen Rechnungen zum Schichtenmodell zur Verifizierung des Programms herangezogen werden, so muß die entsprechende Auswertung vom Antragsteller in das Verfahren eingebracht werden.

## **4 Bewertung der Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung**

### **4.1 Bewertung der Rechnungen zum Schichtenmodell mit dem Code SWIFT**

#### **4.1.1 Bewertung der Übertragung des hydrogeologischen Modells in das Rechenmodell**

Die aus der Anwendung des Codes SWIFT mit dem Zwang nach orthogonaler Diskretisierung resultierenden Konsequenzen und Unsicherheiten wurden bereits in dem Bericht /BAL 88/ ausführlich diskutiert. Die Schlußfolgerungen sind:

- Das Finite-Differenzen-Verfahren SWIFT erfordert ein orthogonales Rechengitter, was zu Problemen bei der Abbildung dünner und schräg- bzw. steilstehender Schichten im Modell führt. Diese müssen durch treppenförmige Belegung der Gitter angenähert werden, wobei die Leitfähigkeit innerhalb einer Schicht nur über das Aneinanderstoßen von Blockflächen und nicht über Blockknoten gewährleistet wird.
- Durch diese Annäherung werden die Aquifere geometrisch überrepräsentiert (z. B. eine 70 m mächtige Schicht wird auf zwei 100 m mächtige Maschen verteilt).

Die Flächenkontakte von Leitern und Nichtleitern im Rechenmodell verändern sich gegenüber dem hydrogeologischen Modell, d. h. die Transmissivitäten an den Blockgrenzen werden beeinflusst.

- Die Fließwege vergrößern sich.
- Die treppenförmige Annäherung in allen drei Raumrichtungen führt bei dem Modellgebiet Konrad zu einer Veränderung der Tiefenlage von Aquiferen im Rechenmodell im Vergleich zum hydrogeologischen Modell.
- Die Erhaltung der Transmissivität im vorgelegten Rechenmodell erfordert die Einführung repräsentativer Leitfähigkeiten und Porositäten.

Die Auswirkung dieser geometrischen Veränderungen sowohl des hydrogeologischen Modells als auch der hydrogeologischen Daten auf das Rechenergebnis wurde vom Antragsteller nur für sehr stark vereinfachte Modelle aufgezeigt /STO 86, STR 86/. Insbesondere liegen uns keine Arbeiten des Antragstellers über die Ermittlung der Auswirkungen auf die Potentialverteilung und Stromlinienberechnung und damit auf die Grundwasserlaufzeiten vor, die aus den oben aufgeführten Eingriffen in das hydrogeologische Modell Konrad resultieren.

Der Gutachter hat in 2-D-Parameteruntersuchungen den Einfluß der Teufenlage auf die Abstandsgeschwindigkeit im Oxford untersucht /BAL 88/. Die Rechnungen zeigten eine Abnahme der Abstandsgeschwindigkeit mit zunehmender Teufenlage des Oxford. Aus diesen Analysen lassen sich jedoch keine belastbaren, quantifizierbaren Fehlerbandbreiten für die dreidimensionale Modellrechnung ableiten. Das Gleiche gilt für die Bewertung der Überrepräsentanz von Aquiferen sowie für die Einführung von repräsentativen Leitfähigkeiten.

Zusammenfassend folgt daraus, daß SWIFT mit der Behandlung des hydrogeologischen Modells Konrad an die Grenzen seiner Möglichkeiten stößt. Deshalb hat der Gutachter Vergleichsrechnungen mit anderen Programmen durchgeführt.

#### **4.1.2 Bewertung der Modellrechnungen**

Die Grundwasserstände des Modellgebietes wurden über Druckrandbedingungen an der Modelloberfläche eingestellt, d. h. durch Vorgabe des Füllungsgrades einer jeden

Masche gemäß den Grundwasserhöhengleichungen. Die relativ grobe Modellierung erlaubt es nicht, diese Randbedingung mit Hilfe von Grundwasserneubildungsraten des Modellgebietes zu überprüfen. Hier ist man, wie der Antragsteller selbst ausführt /EU 76.1/ auf Plausibilitätsrechnungen der Ein- bzw. Ausströmrat an der Oberfläche angewiesen.

Für eine qualitative Bewertung der Modellrechnungen des Antragstellers hat der Gutachter eine Reihe von Parametervariationen durchgeführt und weitere Particle-Tracking-Programme eingesetzt. Die Ergebnisse zeigen insgesamt, daß die im Plan aufgeführten Rechenergebnisse (Potentialverteilung, Geschwindigkeitsvektoren) auf der Basis des Rechenmodells plausibel sind.

Eine abschließende Bewertung der vom Antragsteller vorgelegten quantitativen Aussagen zu der Potentialverteilung, den Abstandsgeschwindigkeiten, den Wasserlaufwegen und den Wasserlaufzeiten konnte allein auf der Basis von SWIFT-Nachrechnungen bzw. Parameterrechnungen wegen der oben aufgeführten Probleme bei der Modellierung und Ergebnisinterpretation nicht vorgenommen werden. Daher hat der Gutachter zur Absicherung seiner Bewertung die Finite-Elemente-Codes CFEST und NAMMU eingesetzt (Kapitel 5). Es wurden die Varianten 1 und 2 des Schichtenmodells behandelt.

Der Vergleich mit den Ergebnissen dieser zu SWIFT diversitären Codes zeigt auf, daß die Grundwassergeschwindigkeiten in den Aquiferen in den gleichen Größenordnungen liegen wie die Grundwassergeschwindigkeiten der SWIFT-Rechnungen; die Verläufe der Stromlinien sind ebenfalls vergleichbar. Die Unterkreide- und Oxfordszenarien konnten nachvollzogen werden. Die im Plan ausgewiesenen Grundwasserlaufzeiten von ca. 300 000 Jahren konnten bei Verwendung des Antragsteller-Datensatzes als untere Grenze von Grundwasserlaufzeiten im Schichtenmodell bestätigt werden.

#### **4.2 Rechnungen mit dem Code FEM301**

Anmerkung: Die GRS war nicht mit der Begutachtung der FEM301-Rechnungen beauftragt. Daher sind diese Rechnungen nicht vertieft bearbeitet worden. Aus diesem Grund kann im folgenden auch nur eine kurze Bewertung der Planunterlagen im Vergleich zu eigenen NAMMU-Rechnungen vorgenommen werden.

#### **4.2.1 Übertragung des hydrogeologischen Modells in das Rechenmodell FEM301**

Die Übertragung komplexer geologischer Strukturen, wie sie das hydrogeologische Modell Konrad darstellen, ist mit Finiten-Elementen gut zu bewerkstelligen. Zusätzlich können durch Verwendung von Basisfunktionen höherer Ordnung entweder die Elemente gegenüber FD-Verfahren vergrößert oder aber die Genauigkeit der Ergebnisse in hydraulisch besonders wirksamen Bereichen gesteigert werden. Dies wurde vom Antragsteller genutzt insbesondere durch Elementverfeinerung in den Bereichen von Störzonen und Vergitterungszonen. Die geometrische Übertragung des hydrogeologischen Modells erscheint nach den uns vorliegenden Unterlagen plausibel. Aussagen über die Abbildung der Störungen und damit deren hydraulischer Wirkung lassen sich daraus jedoch nicht entnehmen. Die Störzonen sind modelliert und werden für die Störzonenrechnungen mit entsprechenden hydrogeologischen Daten belegt.

#### **4.2.2 Modellrechnungen mit FEM301**

Schichtenmodell:

Die Auswertung mittels Trajektorien ergibt für die beiden Varianten ähnliche Stromlinienverläufe wie in den SWIFT-Rechnungen. Daß keine Stromlinien im Aquifer Oxford verbleiben sondern in das Hangende oder Liegende z. B. in den Kimmeridge übergehen, läßt sich auf die Arbeitsweise der Particle-Tracking-Programme zurückführen. Auf die Bewertung der Particle-Tracking-Methoden wird in einem späteren Kapitel noch eingegangen werden.

Im Vergleich mit den GRS-NAMMU Rechnungen sind die vorliegenden FEM301 Rechenergebnisse, wie z. B. die Potentialverteilung im Modellgebiet, plausibel.

Störzonenmodell:

Die uns vorliegenden Unterlagen reichen für eine fundierte Bewertung der Parameterrechnungen zum Störzonenmodell nicht aus. Die vorliegenden Potentialverteilungen und Stromlinienberechnungen erscheinen plausibel.

### 4.3 Bewertung der Auswerteprogramme

Die zur Anwendung gelangten Auswerteverfahren oder Particle-Tracking-Verfahren beschreiben das Transportverhalten der Grundwasserpartikel in einer Grundwasserströmung, d. h. mit ihrer Hilfe werden Stromlinien in einem Strömungsfeld ermittelt. Die Berechnung der Trajektorien erfolgt entweder auf der Basis des berechneten Potentialfeldes oder des abgeleiteten Geschwindigkeitsfeldes.

Diese werden nun in der Auswertung der Grundwasserrechnungen als potentielle Transportwege freigesetzter Radionuklide interpretiert. Stromlinienrechnungen liefern nicht zwangsläufig die kürzesten Laufzeiten und -wege von Radionukliden, da die physikalische Beschreibung von Transportvorgängen von Radionukliden im Grundwasser neben der advektiven Transportkomponente (die der Stromlinienberechnung zugrunde liegt) auch die Transportkomponenten der hydrodynamischen Dispersion berücksichtigt. Die Dispersion liefert einen nicht zu vernachlässigenden Anteil am räumlichen Transportverhalten von in Grundwasser gelösten Stoffen. Daraus folgt, daß Stromlinienrechnungen und Transportrechnungen nicht zwangsläufig zu gleichen Ausbreitungswegen führen. Dies gilt insbesondere für in Aquitarden eingebettete geringmächtige Aquifere mit einer schichtparallelen Hauptströmungskomponente und einer relativ kleinen Komponente vertikal zur Schicht. Stromlinien folgen hier im wesentlichen dem Vektorfeld der Grundwassergeschwindigkeit, d. h. sie verlassen aufgrund der (wenn auch noch so geringen) vertikalen Geschwindigkeitskomponente den Aquifer, was dem Freisetzungsverlauf einzelner Partikel entsprechen kann. Der Transport von Wasserinhaltsstoffen, z. B. einer Radionuklidwolke, hingegen erfolgt jedoch im wesentlichen in Hauptströmungsrichtung des Aquifers.

Bei der Auswertung des Oxfordszenarios im Schichtenmodell wird die Diskrepanz zwischen den erwarteten Freisetzungsverläufen und den Ergebnissen der Auswerteprogramme besonders deutlich. Lediglich die Auswertung der SWIFT-Rechnungen mit den Stromlinienprogrammen des Antragstellers und des Gutachters lieferten den erwarteten Freisetzungsverlauf im Oxford.

Die Stromlinienrechnungen des Antragstellers mit FEM301 weisen den oben besprochenen Verlauf auf; die Stromlinien verlassen das Oxford. Ähnliche Ergebnisse liefert die Anwendung der Auswerteprogramme auf die NAMMU-Rechnungen des Gutachters.



Particle-Tracking-Methoden liefern die Stromlinien eines Grundwasserströmungsfeldes. Sie können ebenfalls zur Ermittlung potentieller Transportwege für Wasserinhaltsstoffe wie z. B. Radionuklide herangezogen werden. Sie liefern jedoch nicht zwangsläufig die kürzesten Freisetzungswege und -zeiten. Hier können gegebenenfalls für komplexe Geometrien und Grundwasserströmungsverhältnisse mehrdimensionale Nuklidtransportrechnungen zur Bewertung herangezogen werden.

## **5 Das Rechenprogramm NAMMU des Gutachters**

### **5.1 Einleitende Beschreibung**

Das von der GRS zur Begutachtung der Grundwassertransportrechnungen eingesetzte Rechenprogramm wurde von der Theory of Fluids Group im englischen Kernforschungszentrum Harwell als Rechenprogrammpaket NAMMU (Numerical Assessment Method for Migration Underground) /RAE 81, ATK 85a, ATK 85b/ entwickelt. Es faßt in seiner derzeitigen Version die früher getrennten Programme zur Simulation der Grundwasserströmung (NAMMU) und des Radionuklidtransports (NAMSOL) zusammen.

In NAMMU sind die entsprechenden physikalischen Grundgleichungen für Hydrogeologie und Stofftransport programmiert. Die Eingabedaten werden in einem allgemeinen Eingabeprozessor TGIN für die Benutzung in NAMMU aufbereitet. Auch für die Lösung des partiellen Differentialgleichungssystems wird ein allgemeines Lösungsverfahren TGSL verwendet. Die Ergebnisse werden schließlich mit einem Grafikpaket THGRAF bzw. THSUNI so aufbereitet, daß sie über ein entsprechendes Interface mit verschiedenen Softwarepaketen geplottet werden können, z. B. durch THDISP mit DISSPLA. Bild 1 gibt den Programmablauf schematisch wieder.

### **5.2 Implementierte Grundgleichungen**

NAMMU enthält Modelle zur Berechnung der Grundwasserströmung im gesättigten oder ungesättigten porösen oder geklüfteten Medium und des Transports von Salzlauge und Energie. Dabei wirkt sich die veränderliche Dichte auf das Strömungsfeld aus. Außerdem kann der Transport von Radionukliden oder anderen

Schadstoffen simuliert werden, die aufgrund der geringen Konzentrationen nicht auf das Strömungsfeld rückkoppeln. Grundsätzlich wird dabei vorausgesetzt, daß die Strömung dem Darcy-Gesetz folgt, daß sich das durchströmte Medium nicht bewegt und daß sich das Strömungsmedium und das durchströmte Medium im thermischen Gleichgewicht und Sorptionsgleichgewicht befinden.

Für den Basisfall, nämlich Strömung und Transport in gesättigtem porösem Medium ohne Dichterückkopplung, sind folgende Grundgleichungen in NAMMU implementiert:

Für den Grundwasserströmung

- die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}(n\rho_F) + \nabla \cdot (\rho_F \bar{v}_D) = 0 \quad (5.1)$$

- die Impulsgleichung (Darcy-Gesetz)

$$\bar{v}_D = -\frac{\bar{k}}{\mu_F}(\nabla p - \rho_F \bar{g}) \quad (5.2)$$

Für den Energietransport

$$(n\rho_F C_{HF} + (1-n)\rho_R C_{HR}) \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_F C_{HF} \bar{v}_D \nabla T - \bar{D} \nabla^2 T = Q_H \quad (5.3)$$

Für den Laugentransport

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_F n C_S) + \nabla \cdot (\rho_F n C_S \bar{v}_D) - \nabla \cdot (\rho_F n \bar{D} \cdot \nabla C_S) = 0 \quad (5.4)$$

Für den Radionuklidtransport

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(nR_{DN} C_N) + \nabla \cdot (\bar{v}_D C_N - \nabla \cdot (n \bar{D}_N - \nabla C_N)) = \\ \lambda_{N-1} n R_{DN-1} C_{N-1} - \lambda_N n R_{DN} C_N + nQ_N \end{aligned} \quad (5.5)$$

Für die Dichte

- bei mischbaren Flüssigkeiten

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = (1 - C_S) \frac{1}{\rho_W} + C_S \frac{1}{\rho_S} \quad (5.6a)$$

- bei Salzlauge

$$\rho = \rho_w \left( \frac{\rho_s}{\rho_w} \right) C_s \quad (5.6b)$$

Für die Viskosität

- bei Salzlauge z. B.

$$\mu_F = 1.002 \cdot 10^{-3} (1 + 0,4819 C_s - 0,2774 C_s^2 + 0,7814 C_s^3) \quad \left( \frac{kg}{ms} \right) \quad (5.7)$$

Für die Dispersivität

$$\bar{D} = D_m \bar{I} + \bar{D}_n \quad (5.8)$$

mit

$$D_{nij} = \alpha_T \bar{v} \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_i v_j}{v} \quad (5.8a)$$

Für die Berechnung der Strömung und des Energietransports im ungesättigten Medium sind die entsprechenden Gleichungen (2.1, 2.2 und 2.3) zu modifizieren, um der Tatsache Rechnung zu tragen, daß die Poren des durchströmten Mediums nicht vollständig von dem Fluid erfüllt sind /JAC 85/.

In NAMMU wird dabei die Voraussetzung gemacht, daß das in den Poren befindliche Gas immobil ist und sich auf Atmosphärendruck befindet. Für die Permeabilität wird ein relativer Wert eingeführt, der von der Sättigung des durchströmten Mediums, d. h. dem Verhältnis des von Wasser erfüllten zum gesamten Porenraum abhängt. Die Beziehung zwischen relativer Permeabilität und Sättigung läßt sich empirisch ermitteln. Damit werden die Gleichungen 5.1 und 5.2 ersetzt durch

$$\frac{\partial}{\partial t} (n \rho_F S) + \nabla \cdot (\rho_F \bar{v}_D) = Q \quad (5.9)$$

$$\bar{v}_D = - \frac{\bar{k} K_R(S)}{\mu_F} (\nabla p^T - \rho_F \bar{g}) \quad (5.10)$$

Für den Druck gilt unter den genannten Annahmen für das in den Poren eingeschlossene Gas

$$p^T = - p_c (S), \quad (5.10a)$$

wobei der Kapillardruck in empirisch zu ermittelnder Form von der Sättigung abhängt.

Die angeführten Grundgleichungen sind in mehrdimensionaler Form in kartesischen Koordinaten und in zweidimensionaler Form in Zylinder-Koordinaten implementiert. Diese Gleichungen, welche die Vorgänge innerhalb des Modellgebiets beschreiben, werden noch ergänzt durch Randbedingungen, die die Variablen oder deren Ableitung auf dem definierten Rand zeitlich konstant oder zeitlich veränderlich vorschreiben. Der für die Ermittlung des Strömungsfeldes wesentliche Parameter, nämlich die Permeabilität, kann anisotrop angegeben werden. Da sowohl der Salzlaugentransport als auch der Energietransport durch die veränderliche Dichte auf das Strömungsfeld zurückwirken, muß bei Problemstellungen, in denen diese Vorgänge eine Rolle spielen, auch das Strömungsfeld transient behandelt werden. Der Radionuklidtransport wird auf der Basis des errechneten Strömungsfeldes als instationärer Vorgang simuliert. Die dafür notwendigen Quellstärken und bestimmenden Parameter können nuklidspezifisch angegeben werden.

### 5.3 Numerisches Lösungsverfahren

Der Kern von NAMMU ist ein ebenfalls in Harwell entwickeltes numerisches Lösungsverfahren TGSL /JAC 82/. Dieses Verfahren basiert auf der Methode der finiten Elemente und zwar im speziellen auf dem Galerkin-Verfahren.

TGSL löst ein System von gekoppelten nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen der Form

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha(\bar{u})) + \bar{\beta}(\bar{u}) \cdot \nabla \bar{u} + \nabla \cdot (\gamma(\bar{u}) \nabla \bar{u}) = 0 \quad (5.11)$$

für den Raum  $\Omega$  mit  $\bar{u}$  als dem Feld der Lösungsvariablen und  $\alpha$ ,  $\bar{\beta}$  und  $\gamma$  als bekannte Funktionen dieser Variablen.

Zur vollständigen Definition des Problems sind noch die Randbedingungen notwendig. Diese können entweder die Form der Dirichlet'schen Randbedingungen haben

$$\bar{u} = \Phi \text{ für den Rand } \Gamma,$$

d. h. auf dem Rand ist die Lösungsvariable selbst vorgeschrieben oder die Form der Neumann'schen Randbedingung

$$\bar{n} \cdot \gamma(\bar{u}) \cdot \nabla \bar{u} = \chi \text{ für den Rand } \Gamma_2$$

d. h. die Ableitung der Lösungsvariablen normal zum Rand wird vorgeschrieben, indem ein entsprechender Fluß definiert wird. Zur numerischen Behandlung wird der Raum, in dem das Differentialgleichungssystem gültig ist, in eine Anzahl von Teilgebieten, die sogenannten Elemente, mit einfacher Geometrie unterteilt. Innerhalb dieser Elemente werden die Verläufe der Lösungsvariablen durch Polynome approximiert. Diese Funktionen sind dann durch einige wenige Parameter bestimmt, deren Werte mit Hilfe von Stützstellen im Element, den sogenannten Knoten, ermittelt werden können.

Die Zahl der Knoten, die ein Element besitzen muß, hängt von den Polynomen ab, die für die Ansätze verwendet werden. Lineare Ansätze benötigen Knotenpunkte in den Ecken der Elemente, d. h. bei dreidimensionalen quaderförmigen Elementen 8 Knoten, da für die entsprechenden trilinearen Ansätze 8 freie Parameter bestimmt sind:

$$\hat{u}(\xi\eta\zeta) = a_0 + a_1\xi + a_2\eta + a_3\zeta + a_4\xi\eta + a_5\xi\zeta + a_6\eta\zeta + a_7\xi\eta\zeta \quad (5.12)$$

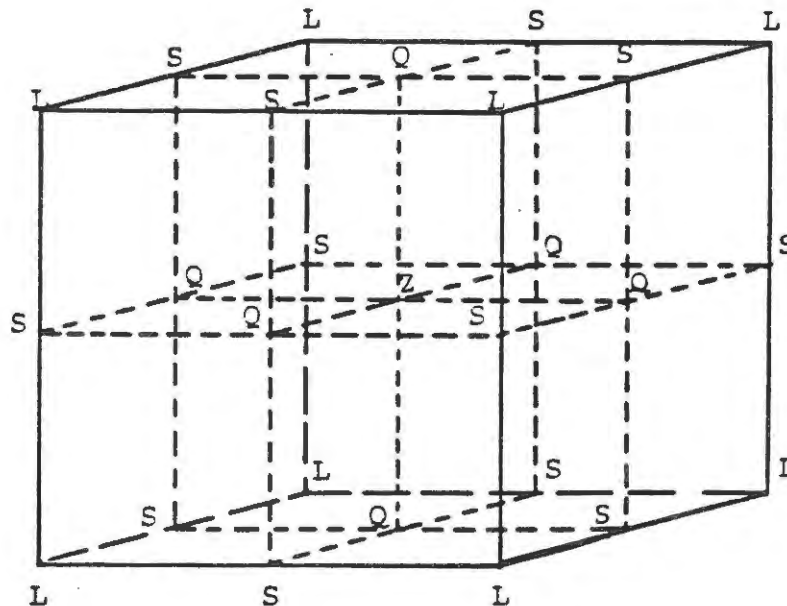
Für entsprechende Elemente mit triquadratischem Ansatz werden 27 Knoten benötigt, wenn die entsprechenden freien Parameter den Ansatz funktional bestimmen

$$\hat{u}(\xi\eta\zeta) = a_0 + a_1\xi + a_2\eta + a_3\zeta \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} &+ a_4\xi\eta + a_5\xi\zeta + a_6\eta\zeta + a_7\xi\eta\zeta \\ &+ a_8\xi^2 + a_9\eta^2 + a_{10}\zeta^2 \\ &+ a_{11}\xi^2\eta + a_{12}\xi^2\zeta + a_{13}\xi^2\eta\zeta \\ &+ a_{14}\xi\eta^2 + a_{15}\eta^2\zeta + a_{16}\xi\eta^2\zeta \\ &+ a_{17}\xi\zeta^2 + a_{18}\eta\zeta^2 + a_{19}\xi\eta\zeta^2 \\ &+ a_{20}\xi^2\eta^2 + a_{21}\xi^2\zeta^2 + a_{22}\eta^2\zeta^2 \\ &+ a_{23}\xi^2\eta^2\zeta + a_{24}\xi^2\eta\zeta^2 + a_{25}\xi\eta^2\zeta^2 \end{aligned}$$

$$+ a_{26} \xi^2 \eta^2 \zeta^2$$

Neben den vollen quadratischen Elementen, die durch die obige Gleichung mit 27 Freiheitsgraden beschrieben werden (Lagrange-Elemente), sind auch noch solche verfügbar, die den letzten Term der Gleichung nicht berücksichtigen, d. h. den Zentralknoten des Quaders nicht verwenden. Hinzu kommen noch die sogenannten Serendipity-Elemente, die durch Außerachtlassung der letzten sieben Glieder der Gleichung nur 20 Freiheitsgrade besitzen und neben den Zentralknoten auch die Mittelknoten der Seitenflächen der Elemente nicht für die Erstellung der approximierten Funktion verwenden. Dies wird nochmals durch folgende Skizze am Beispiel eines Würfels veranschaulicht, auf den alle Elemente mit sechs Seitenflächen zurückgeführt werden.



Knotenbezeichnungen für

L = Lineare

S = Serendipity quadratisch

Q = 26-quadratisch

Z = Zentral für 27-quadratisch

Die Parameter der Approximationsfunktionen werden so bestimmt, daß der Fehler beim Einsetzen in das Differentialgleichungssystem ein Minimum annimmt.

Wie man aus der obigen Skizze ersehen kann, ist es möglich, ein quadratisches Element durch acht lineare Elemente zu ersetzen, wobei man auf die gleiche Anzahl von Knoten kommt. Allerdings läßt sich durch quadratische Elemente eine bessere Approximation des Kurvenverlaufs zwischen den Knoten erreichen, sofern keine starken Gradienten vorliegen.

Zur praktischen Anwendung im Rahmen dieses Berichtes kamen quaderförmige bzw. sechsflächige Lagrange-Elemente und prismenförmige Lagrange-Elemente mit Dreiecksquerschnitt. Serendipity-Elemente würden zwar geringfügige Rechenzeitvorteile bringen, jedoch verliert man bei der Approximation an Genauigkeit. Daher wurden die Elementtypen nicht verwendet. Tetraeder- bzw. Pyramidenelemente wurden ausgeschlossen, weil die Ansatzfunktionen nicht zu denen der anderen Elemente konsistent sind.

Die bisherigen Ausführungen bezogen sich auf die Lösung des Differentialgleichungssystems im Raum. Für die transiente Lösung ist eine ähnliche Vorgehensweise prinzipiell auch durchführbar. Im allgemeinen werden für die zeitliche Integration jedoch andere Verfahren verwendet, ein Weg, der auch in TGSL besprochen worden ist. Die Aufgabe besteht darin, eine Gleichung der Form

$$\dot{y} = \frac{\partial y}{\partial t} = f(y,t) \quad (5.14)$$

numerisch zu integrieren, wobei das Differential durch einen Differenzenquotienten ersetzt wird. Dies geschieht entweder explizit, indem vom Zeitpunkt  $t$  auf den Zeitpunkt  $t + \Delta t$  extrapoliert wird

$$\frac{\Delta y}{\Delta t} = f(y_t, t) \quad (5.15)$$

oder implizit, indem für die Lösung der Werte des Zeitpunktes  $t + \Delta t$  verwendet werden

$$\frac{\Delta y}{\Delta t} = f(y_{t+\Delta t}, t + \Delta t). \quad (5.16)$$

In TGSL sind ein explizites und ein implizites Euler-Verfahren implementiert sowie ein Crank-Nicholson Verfahren, bei dem der Grad des impliziten Anteils an der Lösung mit einem Parameter  $\theta$  frei gewählt werden kann.

$$\frac{\Delta y}{\Delta t} = \theta \cdot f(y_{t+\Delta t}, t + \Delta t) + (1 - \theta) \cdot f(y_t, t) \quad (5.17)$$

Dieses Verfahren ist für  $\theta = 1/2$  ein Verfahren zweiter Ordnung. Darüber hinaus sind noch eine Predictor-Correctormethode und ein Verfahren höherer Ordnung nach Gear implementiert.

Bei dem ersteren wird für den Predictor-Schritt ein explizites Verfahren angesetzt während der Corrector-Schritt implizit arbeitet. Das Verfahren nach Gear ist eine Erweiterung, bei dem für die Extrapolation des Predictor-Schrittes nicht nur der letzte Zeitpunkt, sondern auch noch weiter zurückliegende verwendet werden. Analog wird auch der Correctorschritt behandelt.

Zu den Merkmalen expliziter Verfahren gehören, daß die Einzelschritte zwar nicht sehr rechenintensiv, aber aus Stabilitätsgründen nur in kleinen Schrittweiten akzeptabel sind. Implizite Verfahren erfordern pro Schritt einen höheren Rechenaufwand durch Iterationen, können aber größere Schrittweiten zulassen. Das Verfahren nach Gear ist dann vorteilhaft, wenn eine hohe Genauigkeit verlangt wird. Der Rechenaufwand liegt dann in der gleichen Größenordnung wie bei Verfahren erster Ordnung für wesentlich geringere Genauigkeitsanforderungen.

#### 5.4 Ein- und Ausgabeprozeduren

Die für die Erstellung eines Modells notwendige Eingabe der Geometrie, der wesentlichen Parameter und Randbedingungen erfolgt über einen speziellen in Harwell entwickelten Eingabeprozessor TGIN /WIN 84e, WIN 84b/. Dieser erlaubt eine formatfreie Eingabesprache. Der Programmablauf wird mit Hilfe von Kommandos gesteuert während die Parameter über Schlüsselworte definiert werden. Da die meisten Parameter durch Defaultwerte vorbesetzt sind, müssen nicht alle Parameter angegeben werden. So reichen z. B. fast immer die defaultmäßigen Toleranzlimits für eine normale Simulation aus, so daß sie nicht eigens definiert werden müssen.

Die Kommandostruktur ist in verschiedene Ebenen aufgeteilt, wobei an oberster Stelle die Hauptkommandos stehen. Mit dem Kommando



## >> NAMMU

wird das Programmpaket aktiviert. Dieses Kommando besitzt mehrere Unterkommandos, mit deren Hilfe die Größe von Zahlenfeldern, die Variablennamen und die allgemein für das Problem gültigen Parameter definiert werden.

Ein weiteres wichtiges Hauptkommando ist

## >> INITIAL DATA

unter dem mit verschiedenen Unterkommandos z. B. die physikalischen Parameter der verschiedenen Gesteine und des Fluids definiert werden.

Mit dem Kommando

## >> MODEL DATA

wird das Modellgitter aufgebaut. Dies kann zum einen dadurch geschehen, daß zuerst verschiedene Modellbereiche, die auf einfache Weise gemeinsam behandelt werden können, getrennt über die Eingabe von Koordinaten der Eckpunkte, der Feindiskretisierung und Zuordnung von Gesteinstypen erstellt werden. Diese werden dann miteinander kombiniert und u. U. noch nachträglich modifiziert, indem Knotenpunkte verschoben werden, um stark irreguläre Geometrien nachzubilden. Zum anderen kann auch ein zuvor mit NAMMU erzeugtes Modellgitter, welches auf Platte gespeichert wurde, mit Hilfe eines Unterkommandos wieder eingelesen werden. Als letzte Möglichkeit ist vorgesehen, daß ein mit einem anderen FE-Generator erzeugtes Gitter mit Hilfe eines vom Benutzer zur Verfügung zu stellenden Unterprogramms USRGRD mit entsprechenden Leseanweisungen eingegeben werden kann.

Besonders wichtig in bezug auf die Rechenkosten bei umfangreichen komplexen Modellen ist die Möglichkeit, daß die Numerierung der Knoten im Hinblick auf eine optimale Organisation der Lösungsmatrix modifiziert werden kann. Dies kann durch eine explizite Vorgabe der Neunumerierung geschehen, was dann ausreichend ist, wenn mehrere Gitter von regelmäßigem Aufbau miteinander kombiniert wurden. Die optimale Reihenfolge ist hierbei ohne weiteres abschätzbar. Zusätzlich sind noch verschiedene Algorithmen installiert, die bei komplexen Gittern zu effektiverem Matrixaufbau

führen und z. B. deren Frontbreite auf die Hälfte gegenüber einer expliziten Vorgabe reduzieren. Da die Rechenzeit quadratisch von der Frontbreite abhängt, kommen solchen Algorithmen für umfangreiche komplexe Gitter besondere Bedeutung zu. Weiterhin umfaßt die Modellerstellung die Zuordnung von Gesteinsparametern und einzelner Elemente oder Elementgruppen sowie die Definition von Randbedingungen. Außerdem werden noch die Anfangswerte für die Simulation vorgegeben, z. B. eine geschätzte Druckverteilung. Hierzu gehört auch, daß bei Restartläufen die Variablenwerte an den Knoten aus vorangegangenen Rechnungen von Platte eingelesen werden können.

Nachdem das Modell erstellt worden ist, wird mit dem Kommando

**>> SOLVER DATA**

dem Programm mitgeteilt, welche Art von Problemstellung gelöst werden soll, z. B. eine stationäre oder transiente Simulation, Grundwasserströmung oder Nuklidtransport und welche numerischen Verfahren benutzt werden sollen.

Schließlich wird mit dem Kommando

**>> OUTPUT DATA**

die Ausgabe gesteuert. Dieses Kommando kann auch zwischen den einzelnen Schritten Modellerstellung, - modifikation und Lösung des Problems aktiviert werden. Die Ausgabe umfaßt eine Druck- und eine Plotausgabe sowie die Speicherung der Ergebnisse der Modellerstellung und der Rechnung auf Plattendateien. Die einzelnen Ausgabeoptionen werden durch Unterkommandos gesteuert.

Die Plotausgabe umfaßt im einzelnen

- die Darstellung des Modellgitters
  - als dreidimensionales Bild
  - an der Oberfläche
  - als Schritt
- die Element- und Knotennummern im Modellgitter

- den Schichtenaufbau des Modellgitters
  - als 3D-Bild
  - als Schnitt
  - als Projektion von einzelnen Schichten
- die Isolinien der Lösungsvariablen
  - auf der Oberfläche
  - in Schnitten
- dem Verlauf der Lösungsvariablen längs spezifizierter Linien im Raum
- den Verlauf der Lösungsvariablen an spezifizierten Punkten als Funktion der Zeit.

Darüber hinaus können bei Grundwasserströmungsrechnungen aus der ermittelten Druckverteilung die Geschwindigkeiten und die Trajektorien berechnet und im Modellgitter geplottet werden. Im konkreten Anwendungsbeispiel werden entsprechende Bilder gezeigt. Die Bearbeitung der Plotausgabe erfolgt so, daß die spezifizierten Plots in einem Raster von 1000 x 1000 Punkten erstellt und in kompakter Form auf eine Zwischendatei geschrieben werden. Mit einem für die jeweilige Installation entwickelten Interface wird diese Datei dann gelesen und so aufbereitet, daß die Daten von der zur Verfügung stehenden Plotsoftware weiterverarbeitet werden können.

Alle Plots, die aus einem 3D-Modellgitter abgeleitet werden, nämlich Modellaufbau, Schnitte, Isolinien, Geschwindigkeitspfeile und Trajektorien, sind als 3D-Bilder auf der Zwischendatei gespeichert. Sie können durch Modifikation der die Projektion definierenden Daten unter verschiedenen Blickwinkeln dargestellt werden, ohne daß die Bilder neu mit NAMMU erstellt werden müssen. Beispiele hiervon werden ebenfalls später gezeigt.

## **5.5 Qualitätsnachweis**

Der Qualitätsnachweis für das Programmpaket NAMMU kann auf verschiedenen Stufen durchgeführt werden. Hier ist zum einen die Anwendung des Programms auf verschiedenartige Problemstellungen und durch verschiedene Benutzer, zum anderen die Verifizierung durch Vergleich mit anderen ähnlichen Programmen anhand von

Benchmarkrechnungen und schließlich die Validierung durch Vergleich mit Experimenten zu nennen.

NAMMU ist außer in der GRS auch in verschiedenen Organisationen in Großbritannien

- im Forschungszentrum
- bei der englischen Strahlenschutzbehörde NRBP
- bei dem Ingenieurbüro Atkins als Auftragnehmer des englischen Umweltministers

in Schweden

- bei dem Endlagerentwickler SKB
- bei der Genehmigungsbehörde SKI

in der Schweiz

- bei dem Endlagerentwickler NAGRA

in der Bundesrepublik Deutschland

- bei der BGR
- bei der GRS

installiert und wird dort für verschiedene Aufgaben, z.B. im Genehmigungsverfahren für das schwedische Endlager SFR, eingesetzt. Darüber hinaus hat Harwell im Auftrag der SKB und der NAGRA deren Rechnungen für die Sicherheitsstudien KBS-3 bzw. Projekt Gewähr durch Nachrechnungen mit NAMMU überprüft /ATK 84, ROB 86/. Durch die Verbreitung des Programmpaketes, dessen Implementierung auf verschiedenen Rechenanlagen und die Anwendung auf unterschiedliche Wirtsgesteine kann davon ausgegangen werden, daß Unstimmigkeiten im Programm entdeckt und behoben werden. Zudem führt AERE Harwell ein Forum zum Erfahrungsaustausch und zur Anregung von Weiterentwicklungen, den "NAMMU-USER"-Club, durch.

Zusätzlich zu der breiten Anwendung von NAMMU werden das verwendete allgemeine Lösungsverfahren TGSL und die Ein- und Ausgabeprozessoren auch im Rahmen anderer Programmpakete für spezielle Anwendungsbereiche, nämlich

- ENTWIFE zur Simulation von Naturkonvektionsvorgängen,
- WIFE für die Berechnung turbulenter Strömung,
- WAFT für die Ermittlung von Tracer-Transportvorgängen in Öllagerstätten

eingesetzt. Durch die Anwendung des numerischen Verfahrens auf die unterschiedlichsten physikalischen Phänomene können grundsätzliche Fehler zum größten Teil ausgeschlossen werden. Im weiteren kann davon ausgegangen werden, daß das Verfahren im Hinblick auf Kosten optimal gestaltet ist.

Ein weiterer Schritt im Qualitätsnachweis von Rechenprogrammen ist die Verifikation. Bezüglich der Simulation der Grundwasserströmung hat der Code NAMMU an dem internationalen Projekt zur Verifizierung von Grundwassermodellen HYDROCOIN (Hydrological Code Intercomparison /HYD 88/) teilgenommen. Von den sieben im ersten Level dieser Studie definierten Benchmarkproblemen hat NAMMU folgende simuliert, nämlich

- Case 1  
Transiente Strömung um ein Bohrloch in einem Kluffgrundwasserleiter  
/HER 85 b/,
- Case 2  
Stationäre Strömung in einem Gebirgsabschnitt mit zwei durchlässigen Klüften  
/HER 85 a/,
- Case 4  
Transiente thermische Konvektion in einem gesättigten porösen Medium  
/CHE 85/,
- Case 6  
Grundwasserströmung in einem großräumigen hydrogeologischen Modell mit Permeabilitätskontrasten
- Case 7  
Gesättigte zweidimensionale Strömung durch ein oberflächennahes Endlager in tonigem Medium /HER 85 b/.

Die Fälle wurden so ausgewählt, daß durch verschiedene physikalische Phänomene ein breites Spektrum der Verifizierung abgedeckt werden konnte. Dabei wurden Case

1 und Case 4 mit einer analytischen Lösung verglichen. Beide ergaben eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den NAMMU-Ergebnissen und der analytischen Lösung. Im Case 2 zeigte NAMMU eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen anderer Programme sowohl hinsichtlich der Potentialverteilung als auch hinsichtlich der Trajektorien. Allerdings zeigte sich bei diesem Beispiel auch, daß Dreieckselemente in 2D-Modellen ungenaue Lösungen ergeben. Ähnliche Aussagen können auch für den Case 7 gemacht werden.

Die GRS sieht insbesondere im Fall 6 eine relevante Problemstellung, zum einen wegen seiner Anlehnung an die Geologie eines tatsächlichen Standortes und zum anderen wegen den gegenüber anderen Fällen unterschiedlich definierten Randbedingungen (Infiltrationsrate anstelle des Grundwasserspiegels). Die Ergebnisse sind in /BOG 88/ dokumentiert. Die Studie kam zu dem Schluß, daß NAMMU auch für diesen Fall im gleichen Umfang wie die anderen Rechenmodelle verifiziert ist.

Bezüglich des Radionuklidtransports ist NAMMU verglichen worden mit einer analytischen Lösung eines 3-dimensionalen Nuklidtransportproblems /HER 84/. Hier zeigte sich, daß eine gute Übereinstimmung für kleine Pecletzahlen vorlag, jedoch die Lösung für  $Pe > 1$  in der Nähe der Gittergrenzen instabil wurde.

Die letzte Stufe des Qualitätsnachweises liegt in der Validation, d. h. entsprechend der IAEA-Definition dem Nachweis, daß die im Programm implementierten physikalischen Gesetzmäßigkeiten die Natur ausreichend genau beschreiben. Im Rahmen der HYDROCOIN-Studie ist die Validierung begonnen worden, woran auch NAMMU beteiligt war. Allerdings ist die Studie aus Mangel an geeigneten Experimenten bzw. Felduntersuchungen mit ausreichend unabhängigen Daten unbefriedigend verlaufen. Entsprechende Ergebnisse sind z. Zt. noch nicht veröffentlicht. Als Weiterführung wurde 1987 das Projekt INTRAVAL (International Nuclide Transport Validation /INT 87/ begonnen. NAMMU nimmt an diesem Projekt teil.

## **6 Anwendung des Codes NAMMU auf den Standort Konrad**

### **6.1 Hydrogeologisches Modell**

Dem hydrogeologischen Modell liegen die Antragsunterlagen zugrunde.

Das Modellgebiet besteht aus einer Nord-Süd-ausgerichteten tektonischen Mulde, die in horizontaler und vertikaler Richtung eine endliche Weite (hier 45 km in Nord-Süd- bzw. 15 km in Ost-West-Richtung und ca. 3 km Tiefe) besitzt (Bild 2).

Die Schichtenfolge des hydrogeologischen Modells ist in der Tabelle 1 zusammengefaßt. Insgesamt werden für die Mulde 12 unterschiedliche Gesteinseinheiten vorgegeben, die 7 Aquifere, 4 Aquitarden und 1 Aquiclude umfassen. Alle Gesteinseinheiten, auch solche, die im Grunde Kluftwasserleiter darstellen, werden als poröse Medien mit entsprechenden effektiven Porositäten behandelt.

Die Basis der Mulde bilden als Aquiclude die salinaren Schichten des Mittleren Muschelkalkes, denen im Hangenden der Kluftwasserleiter Oberer Muschelkalk folgt. Dieser tiefste Aquifer der hydrogeologischen Modelleinheiten erstreckt sich über die gesamte Modellbasis. Dabei wird eine mögliche Leckage in die Salzschiefer des Liegenden als vernachlässigbar angesehen.

Geprägt wird das Grundwasserfließsystem von einem Grundwasser-Potentialfeld, das von Süden nach Norden abfällt und somit einen hydraulischen Gradienten über die Modellachse ausbildet. Im Süden streichen die unteren beiden Aquifere innerhalb des Salzgitter-Höhenzuges an der Erdoberfläche aus und werden durch versickerndes Niederschlagswasser mit Grundwasser gespeist. Aufgrund seiner topographischen Hochlage besitzt dieses Gebiet die höchsten Grundwasserstände und stellt das Grundwasser-Neubildungsgebiet für die tieferen Grundwasserleiter dar. Im topographisch tieferliegenden Nordgebiet streichen die darüber liegenden Aquifere Oxford und Cornbrash an der Erdoberfläche aus und stellen aufgrund der noch zu beschreibenden Modellrandbedingungen das Grundwasser-Abflußgebiet des tieferen Aquifersystems. Dieser nördliche Teil des Modellgebietes besitzt ein geringeres topographisches Relief, so daß keine größeren, oberflächennahen, vertikalen Grundwasserflüsse dem regionalen Süd-Nord-Gradienten des tieferen Untergrunds entgegenwirken.

Das Modellgebiet, wie es in den Rechencode einfließen sollte, ist in Abb. 2 dargestellt.

## **6.2 Randbedingungen**

Die eingangs schon erwähnten salinaren Schichten an der Modellbasis und die die Muldenstruktur seitlich bis zur Modellbasis begrenzenden Salzdomen und -mauern wurden als "no-flow boundaries" modelliert, über die kein Wasseraustausch möglich ist. Als weitere vertikale "no-flow boundaries" wurden die nördlichen und südlichen Modellgrenzen angesetzt.

Durch diese Wahl der Randbedingungen wird das gesamte im Wiederergänzungsgebiet der tieferen Aquifere eindringende Grundwasser durch die Aquifere des Modellgebietes gezwungen und im Grundwasser-Abflußgebiet in den obersten Aquifer eingespeist. Damit findet der gesamte Wasseraustausch über die Modelloberfläche statt, die ihrerseits über den obersten Aquifer mit einer konstanten Druckrandbedingung belegt wird. Diese Druckrandbedingung spiegelt als freie Grundwasser-Oberfläche die Topographie des Modellgebietes wider.

## **6.3 Umsetzung in ein Rechengitter**

Die Umsetzung der hydrogeologischen Verhältnisse des Standortes in ein numerisches Modell beinhaltet für das Programm NAMMU als erstes die Umsetzung einer geologischen Struktur mit ihren Schichtgliedern in ein Maschennetz von Finiten-Elementen. Im Rechenverfahren NAMMU sind hierfür, wie im Kapitel 5 beschrieben, verschiedene Typen von Elementen vorhanden.

Die Maschennetzgenerierung läßt sich

- a) anhand von geologischen Vertikalschnitten oder
- b) anhand von Tiefenlinienplänen geologischer Schichtglieder

durchführen.



Im vorliegenden Fall wurde die erste Möglichkeit gewählt, weil die Hauptkomplexität der regionalen Geologie in der vertikalen Sequenz verschiedener hydrogeologischer Einheiten besteht. Desweiteren lagen eine Reihe von Vertikalschnitten des Modellgebietes vor, was die Möglichkeiten eines sofortigen Vergleichs der Gitter mit den originalen geologischen Vertikalschnitten sowie die sofortige Überprüfung der hydraulischen Verhältnisse jedes einzelnen Schnittes über eine 2D numerische Simulation erlaubt.

Insbesondere die 2D numerische Simulation der Hydrogeologie an den einzelnen Vertikalschnitten läßt eine direkte Bewertung

- der Korrektheit der Netzgenerierung der einzelnen Schnitte
- der Auswirkung der physikalischen Randbedingungen bzw.
- der Wirkungsweise von hydrogeologischen Parameteränderungen und geologischer Neuinterpretationen

zu.

### **6.3.1 2D-Modellgitter**

Der erste Arbeitsgang bei der Generierung von 2D-Maschennetzen anhand von Vertikalschnitten ist die Einteilung der geologischen Schichten in quadratische bzw. dreieckige Netzfeldabschnitte (engl. = patches), wobei jedes Schichtglied, in diesem Fall jede hydraulische Einheit, vertikal mit einem Feldabschnitt beschrieben wird (Bild 3a, b).

Um die Flexibilität der Benutzung von dreieckigen Feldabschnitten für die Gitteroberfläche zu erhalten, wurden Dreieckselemente nur in Ost-West-Richtung genutzt, d. h. mit dieser Vorgehensweise wird das Ausstreichen von Schichteinheiten in Ost-West-Richtung modelliert.

Damit kann längs des zu erwartenden höchsten Grundwasser-Flusses eines 3D-Modells die Diskretisierungsintensität einer hydrogeologischen Einheit beim gleichzeitigen Wegfallen einer anderen erhöht werden.

Zu Beginn werden die Koordinaten der einzelnen Eckpunkte eines Patches aufgenommen. Dies erfolgt über die Eingabe der Schnittpunktkoordinaten von Schichtgrenzen mit meist vertikalen Linien, die aus den geologischen Arbeitsschnitten in Millimeter gemessen übernommen werden. Für die weiteren Modellgenerierungen, z. B. für das Modell des Gutachters /BAL 90/, benutzte die GRS zur Eingabe der Koordinaten einen Digitalisiertisch. Somit läßt sich jedes Patch durch die Nummer des Vertikalschnittes, der hydrogeologischen Einheit und des Blockes identifizieren. Als Blöcke werden in einem Arbeitsschnitt die Bereiche zwischen zwei vertikalen Linien bezeichnet, die den Schnitt in Sektionen teilen. Nach Erzeugung von kompatiblen vertikalen Gitterschnitten, die das spätere 3D-Modell aufbauen, werden die Eckpunktkoordinaten in das Rechenprogramm NAMMU eingelesen. Das Programm erzeugt mit diesem Input das eigentliche FE-Gitter, das über eine "Grid checking" Option auf seine Richtigkeit überprüft werden kann. Um nun die Druckberechnungen für jeden einzelnen Schnitt durchführen zu können, werden den Patches, in Abhängigkeit ihrer geologischen Situation, die physikalischen Eigenschaften - hydraulische Leitfähigkeit und Porosität - zugeordnet. Mit Vorgabe der Modellrandbedingungen, daß Grundwasser nur über die Oberfläche ausgetauscht werden kann und diese als freie Grundwasser-Oberfläche mit einer festen Potentialverteilung belegt ist, bzw. der "no-flow"-Randbedingung für die übrigen drei Seiten, wurden nun die einzelnen Gitterschnitte über eine 2D-Simulation auf ihre hydraulische Wirkungsweise überprüft.

Bild 4b zeigt die Abbildung der Hydrogeologie eines solchen vertikalen Gitterschnittes im Vergleich mit dem geologischen Vertikalschnitt im Bild 4a. Als zugehöriges Ergebnis zeigen Bild 4c das Finite-Element-Gitter und Bild 4d die über eine numerische 2D-Simulation berechnete Potentialverteilung.

Die Bilder 5-8 zeigen Beispiele der 2D-Modellgitterschnitte, wobei Bild 5 das Wiedergänzungsgebiet im Südteil, die Bilder 6 und 7 den Bereich des Modellendlagers und Bild 8 das Abflußgebiet im Norden wiedergeben.

### **6.3.2 3D-Modellgitter**

Nach Korrektur etwaiger Unstimmigkeiten wurden die generierten und überprüften 2D-Vertikalgitterschnitte zu einem 3D-Maschennetz zusammengefügt (Bild 9).

Hierfür wurden zunächst die Netzfeldabschnitte zwischen den Vertikalgitterschnitten beschrieben, wobei im einzelnen zu identifizieren war, welche Blöcke der einzelnen Schnitte miteinander verbunden werden müssen. Dabei wurden die dreieckigen ebenen Netzfeldabschnitte in prismatische Elemente bzw. die quadratischen ebenen Netzfeldabschnitte in quaderförmige Elemente überführt und ihnen neue hydraulische Kennwerte zugeordnet. Diesem so generierten 3D-Modell wurden die schon beschriebenen abflußlosen Randbedingungen an der Modellbasis und den Vertikalrändern zugeordnet und als Oberflächenrandbedingung feste Grundwasser-Standshöhen für die Oberflächeneckpunkte interpoliert.

Die Überprüfung der Belegung der 3D-Patches mit den hydrogeologischen Einheiten erfolgt durch Plotten von Süd-Nord verlaufenden vertikalen Gitterebenschnitten. Sie zeigen das Modellgitternetz in der Verbindung der einzelnen Ost-West-Netzgitterschnitte (Bild 10, 11), wobei auftretende Fehlbelegungen sofort erkennbar werden und sich korrigieren lassen.

Im weiteren wurden zur Überprüfung der abgebildeten Geologie Projektionen hydrogeologischer Einheiten auf die horizontale Ebene, d. h. die Topographie der hydraulischen Einheiten (s. Bilder 12a-c), erzeugt und mit den geologischen Tiefenlinienplänen der geologischen Schichteinheiten verglichen. Auf diese Weise wurden unphysikalisch diskretisierte Bereiche in den Schichtbildern sowie verzerrte Elemente entdeckt und korrigiert.

Durch diese Vorgehensweise wurde das numerische Modell der geologischen Interpretation des Standortes angepaßt. Am Beispiel der Nord-Süd-Schnitte 7 und 8 ist die Umsetzung des hydrogeologischen Modells in das Rechengitter dargestellt (Bilder 13 und 14).

Nach Durchführung der Modellgenerierung und Behebung der Hauptfehler im Maschennetz wurde als Basisfall die Variante 2 definiert, dessen Datensatz mit den hydraulischen Kennwerten in Tabelle 1 aufgelistet ist. Dieser Basisfall berücksichtigt im Modellaufbau die Störzonen nicht als eigene hydrogeologische Einheiten, sondern derart, daß sie hydrogeologische Einheiten versetzen können und veränderte Verbindungen von Einheiten über die Störung darstellen. Das heißt, über die Störungen können verschiedene Aquifere untereinander verbunden oder gegen Aquitarden versetzt werden.

## **7 Ergebnisse der Grundwassertransportrechnungen**

Das Ergebnis der im Kapitel 6 beschriebenen schrittweisen Erstellung des Rechengitters ist ein dreidimensionales hydrogeologisches Rechenmodell des Endlagerstandortes Konrad auf der Basis der Planunterlagen.

Hierbei zeigen die abgebildeten Modellgitterschnitte (Bilder 9 und 14), daß auch komplizierte hydrogeologische Systeme mit mehreren zum Teil auskeilenden und in der Schichtmächtigkeit stark schwankenden Aquiferen sich mit den NAMMU-Prozeduren hinreichend genau abbilden lassen. Dabei ist insbesondere die flächentreue bzw. raumtreue Abbildung durch die angewendeten verschiedenen Finiten-Elemente gegeben.

Dieses generierte 3D-Modellgitter dient als Grundlage der Berechnungen des nachfolgend definierten Basisfalles, den weiterführenden Rechnungen an einem modifizierten Modell und den Parametervariationen.

### **7.1 Ergebnisse zum Basisfall (Variante 2)**

Der Basisfall wurde zunächst mit den Permeabilitäts- und Porositätswerten des Standarddatensatzes des Schichtenmodells (Variante 2) gerechnet. Anschließend wurde die Modellstruktur im Detail solange verändert, bis sich ein physikalisch sinnvoller hydrogeologischer Zustand einstellte. Insbesondere die Detailanbindung von Aquiferen in Störzonen und in den Bereichen der Wiederergänzungs- und Abflußgebiete zeigten einen großen Einfluß auf das Rechenergebnis, nämlich das Druckfeld.

Die Randbedingung an der Modelloberfläche, d. h. die Potentiallinien, wird für die Berechnung des Schichtenmodells über die Topographie an den diskreten Punkten des Rechengitters vorgegeben. Bild 15 zeigt die Umsetzung der gemessenen Isopotentiallinien (15a) in das Rechenmodell (15b). Die Übereinstimmung ist gut, wenn auch die Auflösung im Rechengitter weniger stark ist, als in der Darstellung der Meßwerte.

Die Bilder 15, 17, 18 zeigen als Ergebnis der NAMMU-Rechnung des Basisfalles die Druckpotentialfelder der Ost-West-Modellgitterschnitte im Grundwasser-Einstrombereich des Modells (Bild 16b), in einem Schnitt durch das Endlager Konrad (Bild 17b) und im Grundwasser-Ausstrom aus dem Modell (Bild 18b).

Im Bild 16b zeigen die enggescharten Isopotentiallinien um den Aquifer Oberer Keuper den Grundwasser-Einstrom in die tieferen Aquifere über das Wiederergänzungsgebiet im Süden. Die geschlossenen Potentiallinien deuten gleichzeitig den durch den Salzstock erzwungenen Grundwasser-Strom nach Norden an.

Noch deutlicher wird dies in Bild 16c, in dem die aus dem Potentialfeld des Bildes 16b abgeleiteten Darcy-Geschwindigkeiten geplottet wurden. Die Pfeile stellen eine Projektion der Einheitsvektoren von Darcy-Geschwindigkeiten der Elementzentren auf die Schnittebene dar. Gleichzeitig gibt die Größe der Pfeilspitze die Höhe der durch Farben charakterisierten Geschwindigkeitsbereiche wieder. Das heißt: Alle Pfeile dunkelblauer Farbe liegen im Bereich eines definierten Geschwindigkeitsintervalles, wobei innerhalb eines Intervalles die Größe der Pfeilspitze die Geschwindigkeitshöhe widerspiegelt. Richtung und Pfeillänge geben die Raumrichtung der Geschwindigkeit an (kleine Pfeillängen bedeuten kleine Winkel zwischen Vektoren und Flächennormalen). Die Farbänderung von dunkelblau, hellblau, magenta bis rot stellt eine Abstufung der Intervalle zu kleineren Geschwindigkeiten dar.

Die Bilder 17b, c zeigen das Druck- und Geschwindigkeitsfeld in einem Ost-West-Vertikalschnitt durch das Endlager (Bild 17a). Die Isopotentiallinien verlaufen weitstündig ungefähr parallel der horizontalen Schichtlagerung, was über den damit verbundenen geringen Gradienten in den Aquifere einen schwach ausgeprägten Ost-West-gerichteten Grundwasser-Strom zur Folge hat (Bild 17c). Die Darcy-Geschwindigkeitsvektoren innerhalb der Elemente, die Aquitarden abbilden, zeigen einen dem Potentialgefälle folgenden Vertikalstrom zur Modelloberfläche. Der Hauptstrom des Grundwassers in den Aquifere folgt dem regionalen hydraulischen Gradienten von Süd nach Nord.

Dies wird besonders deutlich am Nord-Süd-Ebenenchnitt durch das Modellgebiet (Bilder 19a-c). Hier zeigen die Bilder das Druckpotentialfeld bzw. das Darcygeschwindigkeitsfeld des Gitterebenenchnittes (Bild 19a) von Süd nach Nord. Im Südteil zeigen die geschlossenen enggescharten Potentiallinien den Grundwasser-Einstrom vom Wiederergänzungsgebiet in die tieferen Aquifere. Die Farbgebung von rot über blau nach rot zeigt eine Potentialdifferenz von 50 m Grundwasser-Höhe an, wobei sich 10 m Grundwasser-Höhenunterschied zwischen 2 blauen Isopotentiallinien ergeben (Bild 19b). Die hohen vertikalen hydraulischen Gradienten innerhalb der Aquitarden deuten den starken Grundwasser-Potentialabbau innerhalb dieser Grundwasser-

Hemmer und die damit verbundene Leckage zwischen den Aquiferen an. Das Bündel von Geschwindigkeitsvektoren südlich des Salzstockes zeigt den ausgeprägten Ausstrom aus den Aquiferen, hervorgerufen durch den Salzstock, und das Ausstreichen der oberen Aquifere an der Modelloberfläche (Bild 19c). Nördlich des Salzstockes zeigen Grundwasser-Potentialfeld und Darcy-Geschwindigkeitsfeld einen ausgeprägten Süd-Nord-gerichteten Grundwasser-Strom innerhalb der Aquifere und einen weniger hohen vertikalen Grundwasserstrom in den Aquitarden. Das Voreilen der Isopotentiallinien im Aquifer Oberer Muschelkalk und die Farbgebung der Pfeile zeigen, daß hier die höchsten Darcy-Geschwindigkeiten erreicht werden. Am nördlichen Modellrand deutet die Richtungsänderung der Pfeile eine Änderung der ausgeprägten Grundwasser-Strömung von Süd nach Nord in eine Ost-West gerichtete Grundwasser-Strömung um die Überschiebung von Meine herum zum Abstromgebiet bei Calberlah im Osten an.

Dies wird im Bild 18a-c deutlich, das einen Ost-West-Vertikalgitterschnitt durch das Abflußgebiet im Bereich der Überschiebung von Meine darstellt. Hier wird dem Geschwindigkeitsfeld durch die nördliche vertikale "no-flow boundary" der Aquifere Oberer Keuper und Oberer Muschelkalk, bzw. aufgrund des Ausstreichens der Aquifere Combrash und Oxford eine starke vertikale Komponente aufgeprägt. Die Größe und Farbgebung der schichtparallelen Geschwindigkeitsvektoren der Aquifere Combrash und Oxford zeigen einen hohen Grundwasser-Abstrom zur Modelloberfläche. Der Rückstrom im Aquifer Oberer Muschelkalk resultiert aus einer Überlagerung der Süd-Nord-Strömung mit den "no-flow boundaries". Die Wirkung von Störzonen läßt sich am Grundwasser-Potentialverlauf auf beiden Seiten der Störungslinie erkennen (Bild 18a).

Der Druckpotentialverlauf vor der Störung ruft in den Aquifern Combrash und Oxford eine erhöhte vertikale und eine schichtparallele Süd-Nord-West-gerichtete Strömungskomponente hervor, die das Grundwasser um die Störung von Meine herumleitet. Hinter der Störung erhält die Grundwasser-Strömung eine starke Ost-West-Geschwindigkeitskomponente.

Die hohen schichtparallelen Geschwindigkeitskomponenten in den Aquiferen Oberer Muschelkalk und Oberer Keuper zeigen, daß sich hier die Störung nicht auswirkt. Weitere Potentialverteilungen an Nord-Süd-Schnitten zeigen die Bilder 20 und 21.

Zusätzlich zu der Abbildung von Druckpotentialen und Darcy-Geschwindigkeiten als Isolinien und Vektoren in vertikalen Ost-West- oder Süd-Nord-Modellgitterschnitten lassen sich diese auch als Projektion einer hydrogeologischen Einheit in die horizontale Ebene darstellen. Diese Projektion, die im allgemeinen die flächenhafte Ausbreitung einer hydrogeologischen Einheit wiedergibt, ist vergleichbar mit dem Tiefenlinienplan einer geologischen Schicht. Bild 22 zeigt dies am Beispiel des Oxford. Hier zeigt sich wiederum deutlich die gute Abbildungsmöglichkeit der Verbreitung einer hydrogeologischen Einheit mit den angewendeten Elementgeometrien. In den Zentren der flächenhaften Projektion der einzelnen Finiten Elemente wurden die Darcy-Geschwindigkeitsvektoren projiziert, wobei ihre Länge und Farbgebung wiederum die Richtung und die Höhe der Darcy-Geschwindigkeiten angeben. Gleichzeitig wurde dieser Vektorfelddarstellung eine Darstellung der zugehörigen vertikalen Druckpotentiallinien überlagert, um somit den direkten Vergleich beider zu ermöglichen.

Das Bild 22 zeigt für das Oxford als Ergebnis der Berechnung des Druck- bzw. Darcy-Geschwindigkeitsfeldes des Basisfalles ein Süd-Nord-gerichtetes Potentialgefälle von mehr als 30 m Grundwasser-Höhe und damit verbunden einen ausgeprägten Grundwasser-Strom vom Einstromgebiet im Südwesten zum Abstromgebiet im Nordosten. Dabei läßt sich im mittleren Bereich des Nordteiles deutlich das Umströmen der Störzonen (z. B. Meine), die das Oxford gegen Aquitarden versetzen, erkennen. Dabei wird die ausgeprägte nördlich ausgerichtete Grundwasser-Strömung schon in einiger Entfernung vor der Überschiebung in eine nordwestliche umgelenkt. Dies bewirkt eine weit nach Westen reichende großräumige Umströmung der Störzonen, wobei sich nördlich der Störungen eine um so größere Grundwasser-Strömungskomponente zu den Abstromgebieten nach Caberlah durchsetzt. Somit wird der große Einfluß der schon angesprochenen Detailanbindungen von Aquiferen in Störzonen auf das Rechenergebnis deutlich.

## **7.2 Ermittlung von Laufzeiten und Laufwegen**

Grundlage für die Berechnung der Trajektorien bildet das berechnete dreidimensionale Grundwasser-Potentialfeld des Modells. Die Ermittlung der Laufwege und Laufzeiten erfolgt mit Hilfe von Prozeduren, die über das Potentialfeld und mit den effektiven Porositäten der hydrogeologischen Einheiten die Grundwasser-Strömungsgeschwindigkeiten berechnen.

Zusätzlich zum Modellseitenriß (Bild 23a) zeigt eine Aufsicht (Bild 23b) den Trajektorienverlauf einer Reihe von Tracern auch in der horizontalen Ebene. Er dient gleichzeitig mit der vertikalen Ebene der räumlichen Interpretation des Trajektorienverlaufs. Die Startpunkte der Trajektorien des Bildes 23a liegen alle im Endlager, das geometrisch aus mehreren quadratischen Elementen des Oxford gebildet wird. Die Trajektorien zeigen in Abhängigkeit des Startpunktes im Endlager einen unterschiedlichen Verlauf. So treten die im unteren Endlagerbereich gestarteten Tracer, aus dem Endlager im Oxford (rot) über die Doggertone (gelb) vertikal nach unten in den Combrash (blau) ein, legen eine mehr oder weniger große horizontale Distanz zurück, um dann wieder senkrecht nach oben über die Doggertone in das Oxford einzutreten. Dort verläuft die Wegstrecke innerhalb des Oxford, um dann im Nordbereich ins Hangende in den Kimmeridge (magenta) bzw. zum Teil in die Unterkreide (schwarz), überzutreten. Das hier vorgegebene Zeitlimit von ca. 3 Millionen Jahren beendet einige Trajektorienverläufe in der Darstellung. Tracer, die im mittleren Bereich des Endlagers gestartet wurden, verlaufen eine längere horizontale Wegstrecke innerhalb des Oxford, um dann über Kimmeridge und Unterkreide die Modelloberfläche zu erreichen. Eine Trajektorie, beginnend im mittleren Endlagerbereich, erreicht nach Durchlaufen eines kurzen Stückes des Oxford und nach einem längeren horizontalen Verlauf im Kimmeridge einen schon frühen vertikalen Aufstieg durch die Unterkreide. Damit zeigt sich, daß in den Aquiferen um den Endlageraquifer Oxford, aber auch im Kimmeridge, eine horizontale Strömungsgeschwindigkeit vorliegt, die die Tracer über eine längere Wegstrecke transportieren. Nähern sich die Trajektorien jedoch den schlecht durchlässigen Aquitardengrenzen, so treten die Tracer in jene ein und durchlaufen die kurzen Distanzen bis zum oberen Aquifer aufgrund der kleinen nun aber vertikal gerichteten Strömungsgeschwindigkeit über lange Zeiträume senkrecht zu den Schichtgrenzen.

Die Auswertung der Trajektorienberechnung zeigt die in Kapitel 4.3 beschriebenen Schwierigkeiten bei der Ermittlung kürzester Laufwege und Laufzeiten. Sie zeigt, daß die Stromlinien, die das Oxford verlassen, Laufzeiten von deutlich größer  $10^6$  Jahren aufweisen. Eine Reihe von Stromlinien verbleiben bis hinter der Überschiebung von Meine im Oxford (Laufweg ~ 20 km) und steigen dann in das Hangende auf. Die Laufzeiten bis zum Austrittspunkt liegen bei ca. 200 000 Jahren, d. h. die mittlere Abstandsgeschwindigkeit im Oxford liegt bei 0.09 m/a, was gut mit den Rechenwerten des Antragstellers übereinstimmt. Der Austritt der Stromlinie aus dem Oxford ist insbesondere im Nordbereich auf die vertikale Geschwindigkeitskomponente (aufgrund des erzwungenen Aufstroms von Grundwasser auf dem Liegenden) zurückzuführen. Die



Abstandsgeschwindigkeit im Oxford hinter der Überschiebung von Meine nimmt in Richtung Calberlah zu (Bild 22) und verläuft nahezu schichtparallel in West-Ost-Richtung (Bild 15). Auf langen Strömungswegen führt die relativ geringe Geschwindigkeitskomponente senkrecht zum Schichtverlauf des Oxford Stromlinien, die das Oxford verlassen. Für das Transportverhalten gelöster Nuklide ist jedoch vom Verbleib des Hauptanteils der Nuklide im Aquifer auszugehen. Daraus folgt für die kürzeste Nuklidtransportzeit dieser Variante eine Zeitspanne von 330 000 Jahren. Der Austrittsbereich liegt im nordöstlichen Modellgebiet bei Calberlah.

### **7.3 Ergebnisse zur Modellvariante 1 (Unterkreideszenario)**

Im nächsten Schritt wurden Parametervariationen am gleichen Modell durchgeführt, wobei die Schichtbelegung des Basisfalles in 12 hydrogeologischen Einheiten beibehalten, aber die einzelnen Einheiten in ihrer Leitfähigkeit variiert wurden. Sensitiv auf die möglichen Ausbreitungswege von Tracern durch die Geosphäre reagierte insbesondere die Variation der Leitfähigkeit des Deckgebirges. So wurden bei einer Erhöhung der Permeabilität der Unterkreide um zwei Zehnerpotenzen (Modellvariante 1), weitere potentielle Ausbreitungswege ermittelt. Diese Aquitarde bestimmt aufgrund ihrer geringen Leitfähigkeit das vertikale Grundwasser-Leitvermögen des gesamten Deckgebirges. Bild 24 zeigt in einer Seitenansicht des 3D-Modells, als Ergebnis der Grundwasser-Druckfeldberechnung und der nachfolgenden Trajektorienberechnung, die potentiellen Ausbreitungspfade der Tracer aus dem Endlager heraus durch die Geosphäre. Die um zwei Zehnerpotenzen erhöhte Gebirgspermeabilität der Unterkreide bewirkt in allen hydrogeologischen Einheiten im Liegenden der Aquitarde höhere vertikale Strömungsgeschwindigkeitskomponenten (Bild 25). Alle Tracer verlaufen nach Verlassen des Endlagerbereichs eine, in Abhängigkeit ihres Endlagerstartpunktes variierende, Wegstrecke durch das Oxford (rot). Dabei ist die zurückgelegte schichtparallele Wegstrecke innerhalb des Oxford (rot) umso kürzer, je höher der Startpunkt innerhalb des Endlagers liegt. So gehen die im oberen Bereich des Oxford gestarteten Tracer noch innerhalb des Endlagerbereiches in den Kimmeridge (magenta) über. Innerhalb dieser hydrogeologischen Einheit deuten die Trajektorien eine größere vertikale Strömungsgeschwindigkeit gegenüber dem Oxford an. Nach Übertreten der Tracer in die Unterkreide (gelb), überwiegt die vertikale Strömungsgeschwindigkeitskomponente. Die Tracer benötigen beim Durchlaufen dieser Teilstrecke, trotz einer Erhöhung der Gebirgspermeabilität um zwei Zehnerpotenzen gegenüber dem

Basisfall, die längste Laufzeit innerhalb der Gesamtstrecke. Nach dem vertikalen Laufweg innerhalb der Unterkreide (gelb) treten die Tracer in den Emscher Mergel (grün) und erreichen nach kurzer Wegstrecke bzw. Laufzeit innerhalb dieser hydrogeologischen Einheit die Modelloberfläche. Somit bestimmt die Unterkreide aufgrund ihrer geringen Permeabilität die Gesamtlaufzeit von Tracern, die über den vertikalen Ausbreitungsweg die Modelloberfläche erreichen.

Die Abstandsgeschwindigkeit im Oxford ist nahezu identisch mit der des Basisfalles (= 0.1 m/a). Im Kimmeridge liegt eine mittlere Abstandsgeschwindigkeit vor, die etwa 20-50 mal kleiner ist als die des Oxford. Die relativ große Horizontalkomponente der Abstandsgeschwindigkeiten in Oxford und Kimmeridge führen zu Stromlinien, die relativ weit im Abstrom des Endlagers verlaufen. Daraus resultieren relativ lange Transportzeiten in den beiden Schichten. Zur Überwindung der stromabgelegenen Unterkreide benötigen alle Tracer Zeiträume größer 1 Mio. Jahre, so daß die kürzeste Laufzeit entlang der Stromlinien zu 1.6 Mio. Jahren ermittelt wurde.

Zur Bewertung dieser Laufzeit- und -wegermittlung gelten die in Kapitel 3.3 ausgeführten Einschränkungen. Auch bei dieser Variante sollte aufgrund der hohen Abstandsgeschwindigkeit im Oxford dieser einen Transportweg darstellen. Particle-Tracking-Methoden sind jedoch nicht in der Lage diesen Fall zu erfassen.

## **8 Zusammenfassende Bewertung**

Die Bewertung der Rechencodes des Antragstellers im Hinblick auf die Anwendung auf den Standort Konrad ergibt:

- Die Verifikation des Codes SWIFT ist für eindimensionale Nuklidtransportrechnungen im Rahmen von INTRACOIN erfolgreich verlaufen.
- Eine Validierung dieses Teils des Rechencodes SWIFT wurde nicht vorgenommen.
- Für die Grundwasserrechnungen ist SWIFT im Vergleich zu den beteiligten internationalen Codes in HYDROCOIN auf der Basis der von ihm behandelten Rechenfälle als verifiziert anzusehen. Bezüglich der komplexen Hydrogeologie am

Standort Konrad sind jedoch Defizite vorhanden, da z. B. ein relevanter Fall (Case 6) von SWIFT nicht behandelt wurde.

- SWIFT ist nicht validiert.
- Der Code FEM301 zeigt im Rahmen von HYDROCOIN gute Übereinstimmung mit den anderen beteiligten Rechencodes. Da die von ihm behandelten Rechenfälle für den Standort Konrad jedoch von geringer Relevanz sind, ergeben sich Defizite in der Verifizierung.
- Sollten die Rechnungen zum Schichtenmodell zur Verifizierung von FEM301 herangezogen werden, so müssen vom Antragsteller die Vergleichsrechnungen und deren Auswertungen eingebracht werden.

Die Bewertung des vom Gutachter eingesetzten Codes NAMMU im Hinblick auf die Standortgegebenheiten Konrad ergab:

- NAMMU hat fünf Fälle des HYDROCOIN Level 1 simuliert. Die Übereinstimmung mit den anderen beteiligten Codes war gut. Gleiches gilt für die Vergleiche mit analytischen Lösungen.  
NAMMU kann auf der Basis der behandelten Rechenfälle als verifiziert angesehen werden.
- Insbesondere stellt der Fall 6 eine relevante Problemstellung zum Standort Konrad dar. Auch dieser Fall wurde von NAMMU behandelt; die Übereinstimmung mit den beteiligten Codes war gut.
- Bezüglich des Radionuklidtransportes ist der Code für kleine Pe-Zahlen im 3D-Bereich als verifiziert anzusehen.
- Die Validierung des Codes steht noch aus.

Für alle Auswerteprogramme (Particle-Tracking-Verfahren) gilt:

- Die Particle-Tracking-Verfahren ermitteln die Stromlinien in einem Grundwasserströmungsfeld. Die Auswertung der HYDROCOIN-Fälle mit Hilfe dieser Verfahren ergab Diskrepanzen bei den Trajektorien. Hier besteht weiterer Entwicklungsbedarf.
- Die Interpretation der Trajektorien als potentielle Freisetzungswege von Wasserinhaltsstoffen ist akzeptabel. Sie stellen jedoch nicht alle möglichen Frei-

setzungswege dar, d. h. mit ihnen erfaßt man nicht zwangsläufig die kürzesten Freisetzungswege und -zeiten.

Die Bewertung der Modellrechnungen mit dem Code SWIFT ergaben, daß

- der Zwang zur orthogonalen Diskretisierung sowie die Begrenzung von Rechnerkapazität die Umsetzung des Schichtenmodells in ein Rechenmodell erschwert,
- der Einfluß der geometrischen und hydrogeologischen Veränderungen des hydrogeologischen Modells bei der Umsetzung in das Rechenmodell auf die Rechenergebnisse (z. B. Druckfeld) nicht abgeschätzt werden kann.

Daraus resultiert der Einsatz diversitärer Rechencodes mit Finiten Elementen.

- Finite Elemente Verfahren sind für die Abbildung komplexer geologischer Strukturen besser geeignet als das Finite Differenzen Verfahren SWIFT. Weiterhin erlauben verschiedene Finite-Elemente-Verfahren den Einsatz Finiter-Elemente höherer Ordnung, deren Verwendung entweder zur Erhöhung der Genauigkeit oder zur Reduzierung des Diskretisierungsaufwandes genutzt werden kann.
- Die Modellierung des Schichtenmodells mit dem Code FEM301 durch den Antragsteller kann hier nur global bewertet werden. Die Umsetzung des hydrogeologischen Modells in ein Rechenmodell erscheint plausibel. Das gleiche läßt sich für die Modellierung des Störzonenmodells sagen. Für eine detaillierte Bewertung beider Modelle reichen die uns vorliegenden Unterlagen nicht aus.

Der Antragsteller weist in seinen Analysen als kürzeste Wasserlaufzeit die Freisetzung durch das Oxford (Variante 2) mit einer Zeitspanne von 300 000 Jahren aus (SWIFT-Rechnung). Diese Laufzeit wird für das Modell des Antragstellers von keiner anderen Variante unterschritten; auch bei Anwendung des diversitären Codes FEM301 wird keine kürzere Grundwasserlaufzeit erzielt.

Für die Ermittlung der kürzesten Grundwasserlaufzeit und des Laufweges hat der Antragsteller sich auf die Particle-Tracking-Verfahren abgestützt. Der Gutachter sieht im Einsatz dieser Methoden eine Möglichkeit zur Ermittlung potentieller Freisetzungswege und -zeiten. Sie liefern jedoch nicht alle möglichen Wege und Zeiten und führen damit nicht zwangsläufig zu den kürzesten Laufzeiten. Für das Schichtenmodell kann das Geschwindigkeitsfeld im Hinblick auf die zu erwartenden Freisetzungswege

interpretiert werden. Die Komplexität der Grundwassersituation steigt im Falle des Störzonenmodells deutlich an, so daß die lediglich die Anwendung von Particle-Tracking-Verfahren zur Ermittlung kürzester Laufzeiten u. U. nicht ausreicht.

Der Gutachter hat für die Begutachtung der Planaussagen zum hydrogeologischen Schichtenmodell sowohl den Code SWIFT als auch den zu SWIFT diversitären Code NAMMU eingesetzt.

- Nachrechnungen mit dem Code SWIFT lieferten das gleiche Druckfeld wie vom Antragsteller vorgelegt. Auswertungen mit dem eigenen Tracker-Verfahren führten zu Freisetzungsläufen, die denen des Antragstellers vergleichbar sind. Sowohl die kürzeste Freisetzungszeit als auch die Szenarien der Planunterlagen konnten bestätigt werden.
- Die Anwendung des Finite-Elemente-Codes NAMMU auf das Schichtenmodell liefert für die Varianten 1 und 2 mit den SWIFT-Rechnungen vergleichbare Darcy-Geschwindigkeiten in den Aquiferen, insbesondere im Einlagerungshorizont des Oxford. Die kürzeste Laufzeit für die Variante 2 (Oxfordszenario) läßt sich auf ca. 330 000 Jahren abschätzen. Der Austrittsbereich von Radionukliden in diesem Szenario liegt im nordöstlichen Modellgebiet bei Calberlah.

Für die Variante 1 (Unterkreideszenario) ergibt die Auswertung der Rechnungen mit dem Particle-Tracking-Verfahren Laufzeiten größer 1.6 Mio. Jahre. Dies beruht im Vergleich zu den Antragsunterlagen auf den relativ langen Transportwegen, die die Tracer im Kimmeridge und Oxford durchlaufen, um weiter stromab in die jetzt mächtigeren Deckschichten der Unterkreide einzutauchen. Diese liefern ähnlich hohe Laufzeiten wie vergleichbare Trajektorien in den Planunterlagen. Vertikal aus dem Endlager aufsteigende Trajektorien wurden mit den in NAMMU gewählten Partikelaufläufen nicht gefunden.

Die Einschränkungen beim Einsatz der Particle-Tracking-Verfahren wurden bereits weiter oben beschrieben.

- Die vom Antragsteller in den Planunterlagen vorgelegten Grundwasserlaufzeiten und potentielle Freisetzungswege zum Schichtenmodell werden vom Gutachter bestätigt.

## 9 Literatur

- /ATK 84/ Atkinson, R., T.P. Cherill, A.W. Herbert, D.P. Hodgkinson, C.P. Jackson, J. Rae, P.C. Robinson:  
Review of the Groundwater Flow and Radionuclide Transport Modelling in  
KBS-3  
AERE-R. 11140, Jan. 1984
- /ATK 85a/ Atkinson, R., A.W. Herbert, C.P. Jackson, P.C. Robinson:  
NAMMU User Guide  
AERE-R. 11364, May 1985
- /ATK 85b/ Atkinson, R., A.W. Herbert, C.P. Jackson, P.C. Robinson:  
NAMSOL User Guide  
AERE-R. 11365, May 1985
- /BAL 88/ Baltes, B.; Bogorinski, P.; Larue, J.:  
Stand der Arbeiten der GRS zur Begutachtung der Langzeitsicherheit des  
Endlagers Konrad  
GRS-A-1499, November 1988
- /BAL 90/ Baltes, B.; Bogorinski, P.; Larue, J.:  
Grundwassermodellrechnungen mit dem Programm NAMMU auf der Basis  
der Daten des hydrogeologischen Gutachters NLfB  
GRS-A-Bericht (in Vorbereitung)
- /BOG 86/ Bogorinski, P.:  
Methoden zur Berechnung des Transports der aus einem Endlager freige-  
setzten Radionuklide in der Geosphäre  
Teil A: Darstellung der GRS-Rechenmodelle  
Teil B: Vorläufige Bewertung der PSE-Methodik  
GRS-A-1200, März 1986
- /BOG 87/ Bogorinski, P.:  
SWIFT im internationalen Vergleich  
GRS-A-1342, Mai 1987

- /BOG 88/ Boghammer, A.:**  
The Verification of NAMMU using HYDROCOIN Level 1 Case 6.  
KEMAKTA AR 88-28, Sept. 1988
- /CHE 85/ Cherrill, T.P., A.W. Herbert:**  
The Verification of NAMMU Using HYDROCOIN Level 1 Case 4: Transient  
Thermal Convection in a Saturated Permeable Medium  
AERE-R. 11952, Oct. 85
- /GRE 88/ Greathead, R.J., A.W. Herbert, C.P. Jackson:**  
A Threedimensional Finite-Element Model of a Hypothetical Repository Site  
for the NAMMU Groundwater Flow Computer Code  
AERE-R. 13143, June 1988
- /HER 84/ Herbert, A. W.:**  
Analytical Solutions to the Threedimensional Radionuclide Transport  
Equation for Computer Code Verification  
AERE Harwell, TP.1058, DOE/RW/84.143, Nov. 1984
- /HER 85a/ Herbert, A. W.:**  
Verification of NAMMU Using HYDROCOIN Level 1 Case :  
Steady-state Flow in a Rock Mass Intersected by Permeable Fracture Zones  
AERE-R. 11636, Jan. 1985
- /HER 85b/ Herbert, A. W.:**  
The Verification of NAMMU Using HYDROCOIN Level 1 Cases 1 and 7:  
Transient Flow from a Bore Hole and Saturated Flow through a Shallow  
Land Disposal Facility  
AERE-R. 11944, Oct. 85
- /HYD 88/ The International HYDROCOIN Project Level 1: Code Verification**  
OECD, 1988

- /INT 84/ INTRACOIN - International Nuclide Transport Intercomparison Study  
Final Report Level 1 - Code Verification  
SKI 84:3, Sept. 1984
- /INT 87/ INTRAVAL Project Proposal  
SKI 87:3, July 1987
- /JAC 82/ Jackson, C.P.:  
The TGSL Finite-Element Subroutine Library  
AERE-R. 10713, December 1982
- /JAC 85/ Jackson, C.P., M.G. Williams:  
Extension to Unsaturated Flow of the Finite-Element Program NAMMU for  
Coupled Heat and Groundwater Flow  
AERE-R. 11735, September 1985
- /LAN 80/ Langguth, H.R., R. Voigt:  
Hydrogeologische Methoden  
Berlin, Heidelberg, New York (Springer), 1980
- /PTB 89/ Physikalisch-Technische Bundesanstalt  
Endlager für Radioaktive Abfälle Schachanlage Konrad  
1989
- /RAE 81/ Rae, J., P.C. Robinson, L.M. Wickens:  
A User's Guide for the Program NAMMU,  
1. General Information  
AERE-R. 10120, June 1981
- /REE 81/ Reeves, M., R. Cranwell:  
User's Manual for the Sandia Waste Isolation Flow and Transport  
(SWIFT), Release 4.81  
NUREG/CR-2324, SAND81-2516, November 1981



- /ROB 86/ Robinson, P.C., C.P. Jackson, A.W. Herbert, R. Atkinson:  
Review of the Groundwater Flow Modelling of the Swiss Project Gewähr  
AERE-R. 11929, February, 1986
- /STO 86/ Storck, R. et al.:  
Langzeitsicherheitsanalysen des Endlagers Konrad  
Radionuklid­ausbreitung in der Nachbetriebsphase  
TA 2242.03, November 1986
- /STR 86/ Struck, S.:  
Testrechnungen zur Übertragung der geologischen Verhältnisse im Unter-  
suchungsgebiet Konrad in das Modell  
TA 2242.03, Dezember 1986
- /WIN 84a/ Winters, K.H., C.P. Jackson:  
A Note on the Keyword Input Facility INPROC  
AERE-M. 3375, January 1984
- /WIN 84b/ Winters, K.H., C.P. Jackson:  
A Guide to Finite-Element Grid Generation Using TGIN  
(Release 1)  
AERE-R. 11530, Oct. 1984

## ANHANG

**Tabelle 1:**

Standarddatensatz der hydrogeologischen Einheiten und ihrer Kennwerte im Basisfall und für die Variante 1 (Unterkreideszenario)

SCHICHTEINHEIT	DURCHLÄSSIGKEITS- BEIWERTE m/s	EFFEKTIVE POROSITÄT in %
Quartär	$10^{-5}$	25
Tertiär	$10^{-5}$	25
Emscher-Mergel	$10^{-8}$	20
Plänerkalke	$10^{-7}$	5
Unterkreide außer Hilssandstein	$10^{-10^*} / 10^{-12^{**}}$	10
Hilssandstein	$10^{-5}$	25
Wealden, Kimmeridge und Münder-Mergel	$10^{-8}$	10
Oxford	$10^{-7}$	2
"Cornbrash"-Sandstein	$10^{-6}$	5
Dogger, Lias und Keuper Ton- und Mergelsteine	$10^{-10}$	10
Rhät	$10^{-6}$	20
Oberer Muschelkalk	$10^{-6}$	2

\* Variante 1

\*\* Variante 2

**Tabelle 2:**

In TGSL verfügbare Grundtypen von Elementen

---

Bezeichnung	Element	Anzahl	Ansatzfunktion
1D:			
LIN2	Linie	2	linear
LIN3	Linie	3	quadratisch
2D:			
QUD4	Rechteck	4	linear
QAD8	Rechteck	8	quadratisch-serendipity
QAD9	Rechteck	9	quadratisch-lagrange
TRI3	Dreieck	3	linear
TRI6	Dreieck	6	quadratisch
3D:			
CB08	Quader	8	linear
CQ20	Quader	20	quadratisch-serendipity
CQ26	Quader	26	quadratisch
CB27	Quader	27	quadratisch-lagrange
PRI6	Dreieckprisma	6	linear
PR15	Dreieckprisma	15	quadratisch-serendipity
PR18	Dreieckprisma	18	quadratisch-lagrange
PYR5	Pyramide	5	linear
PY13	Pyramide	13	quadratisch-serendipity
PY14	Pyramide	14	quadratisch-lagrange
TT04	Tetraeder	4	linear
TT10	Tetraeder	10	quadratisch

---

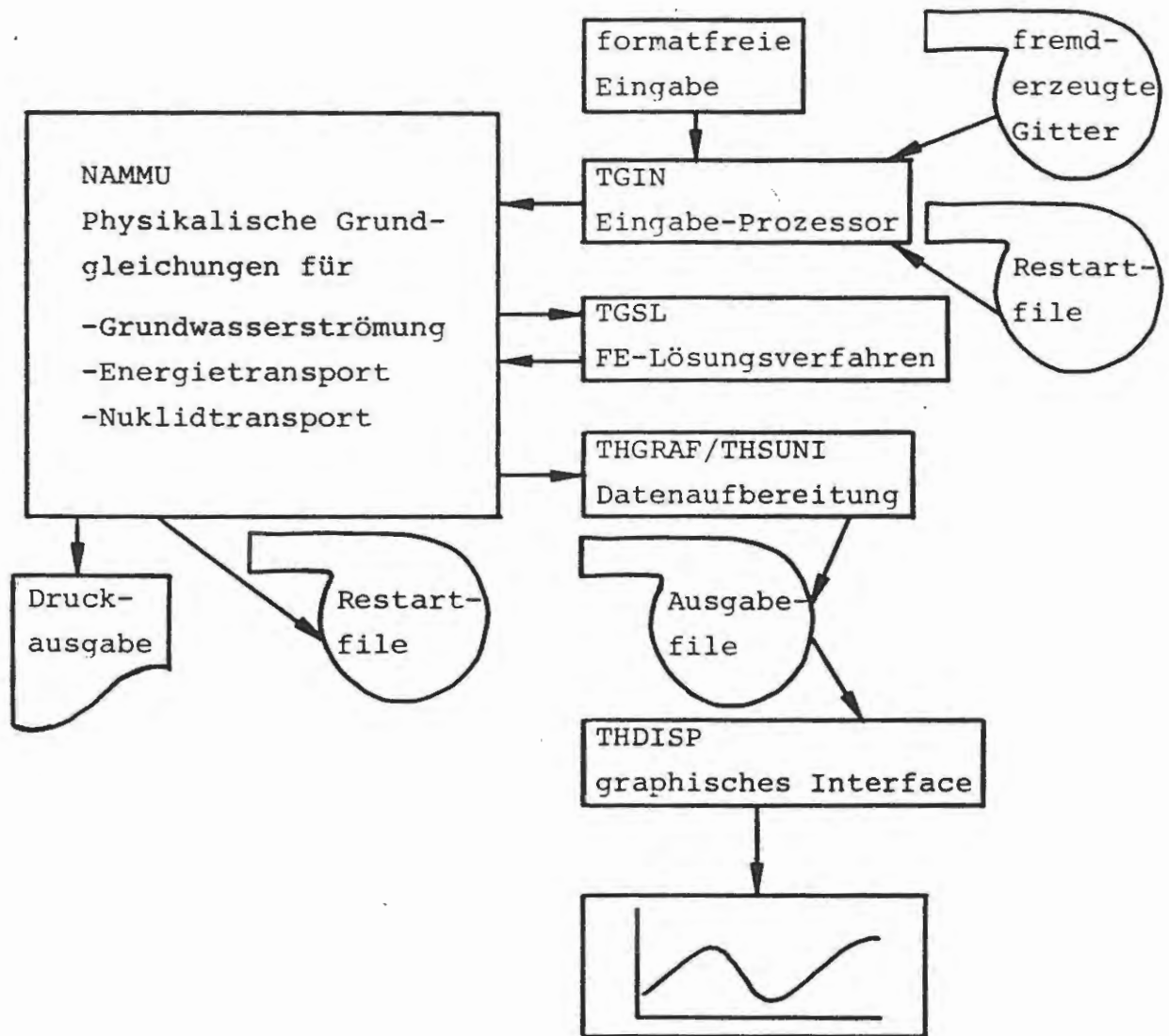
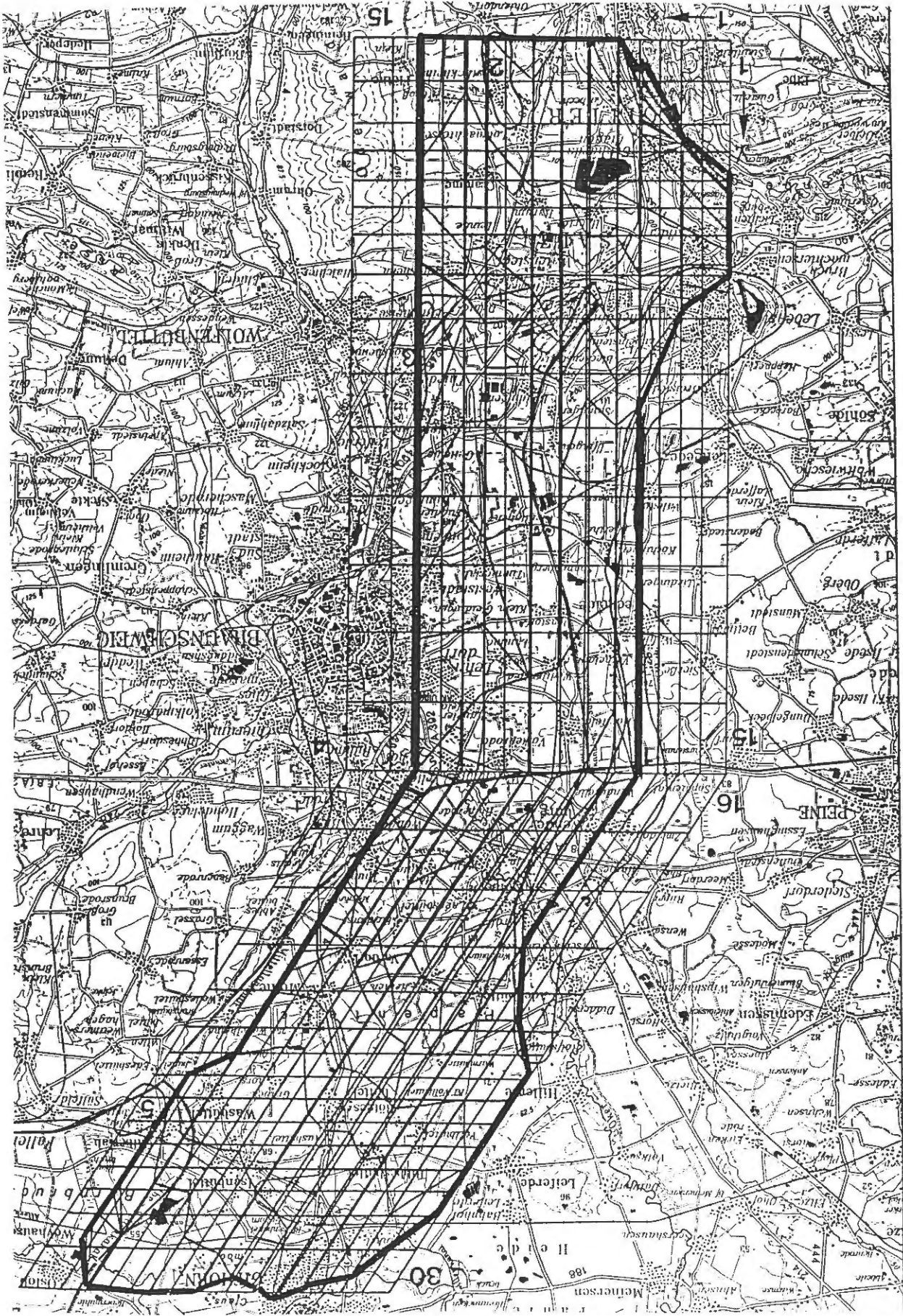


Bild 1:  
Ablaufschema zu NAMMU



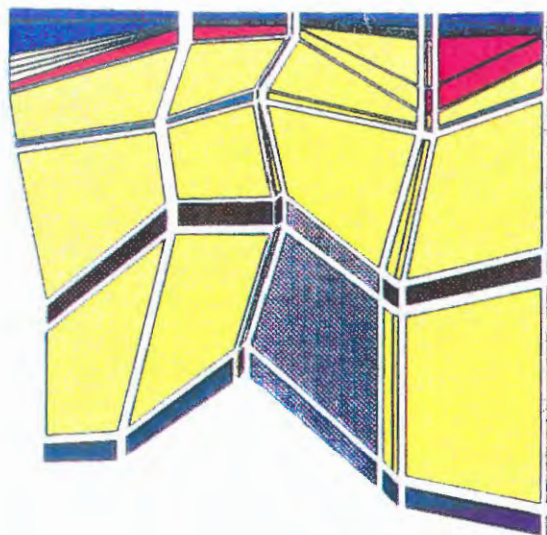
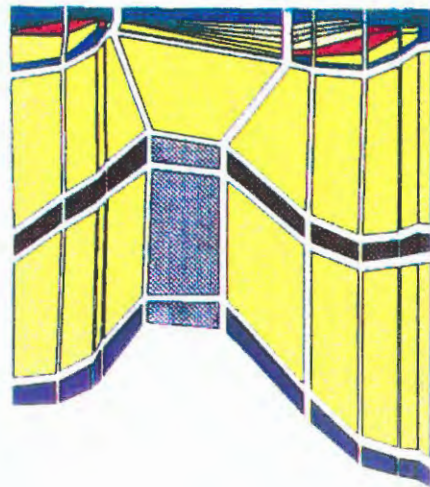
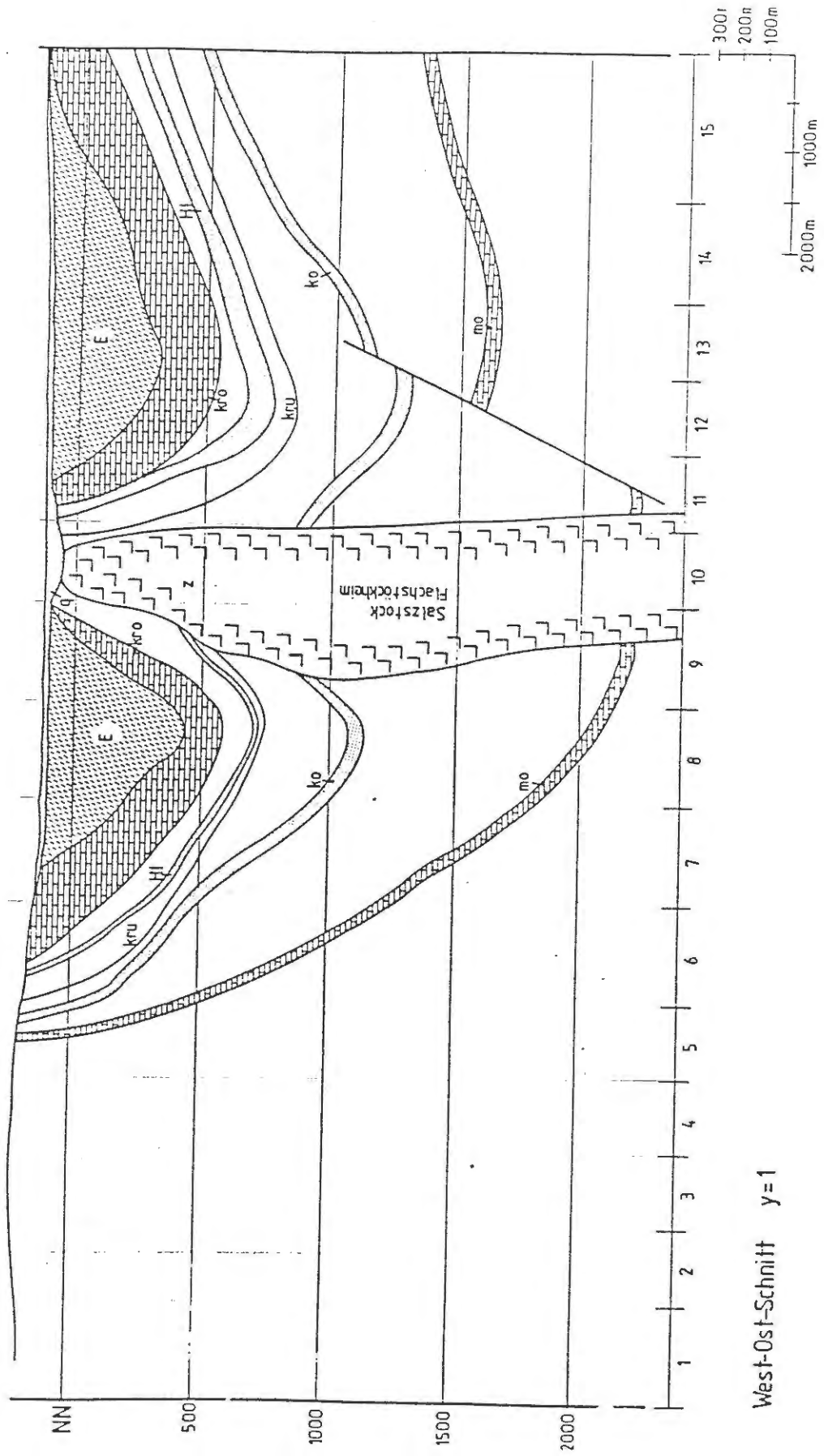


Bild 3a,b:

Aufbau von 2D-Modellgitterschnitten anhand von Netzfeldabschnitten



West-Ost-Schnitt y=1

Bild 4a:  
Geologischer Ost-West-Vertikalschnitt durch das Modellgebiet (Wiederer-  
gänzungsgebiet im Südteil)



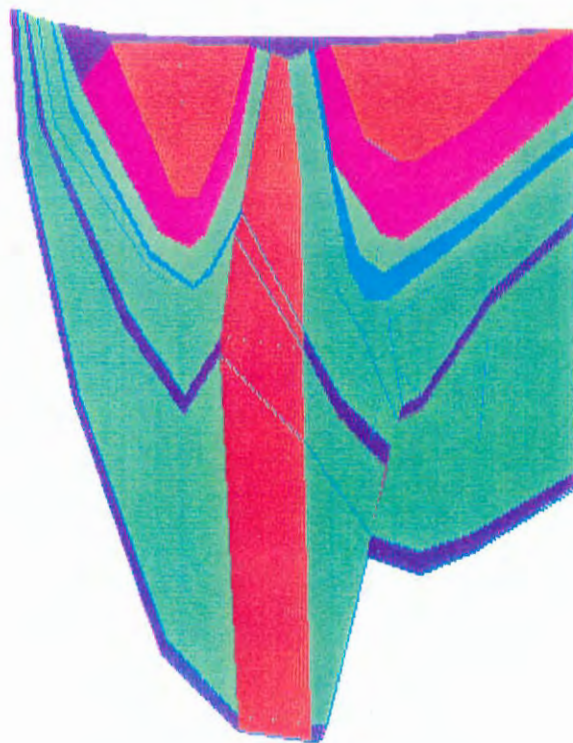


Bild 4b:

Hydrogeologischer 2D-Modellgitterschnitt des Bildes 4a. NAMMU-Ergebnis der Netzgenerierung nach Zuordnung der hydrogeologischen Modelleinheiten

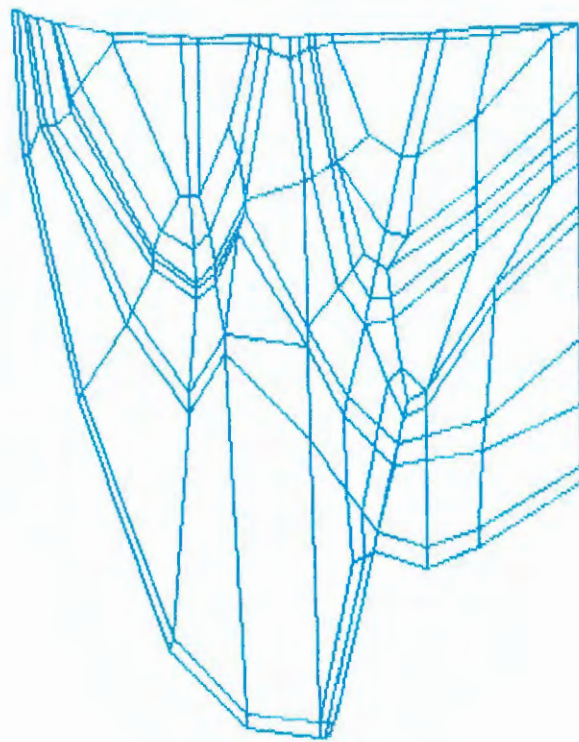


Bild 4c:

2D-Finite Elementgitternetz des Vertikalschnittes im Bild 4a



Bild 4d:

Grundwasser-Potentialfeld als NAMMU-Ergebnis einer 2D-Simulation der hydrogeologischen Verhältnisse im Bild 4a

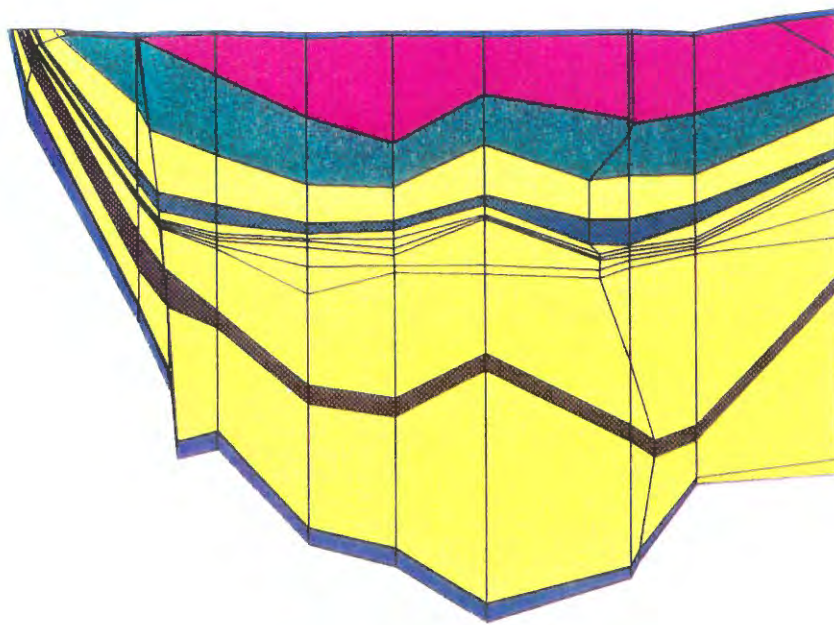


Bild 5:

2D-Modellgitterschnitt (Ost-West-Richtung) durch das Wiederergänzungsgebiet im Süden

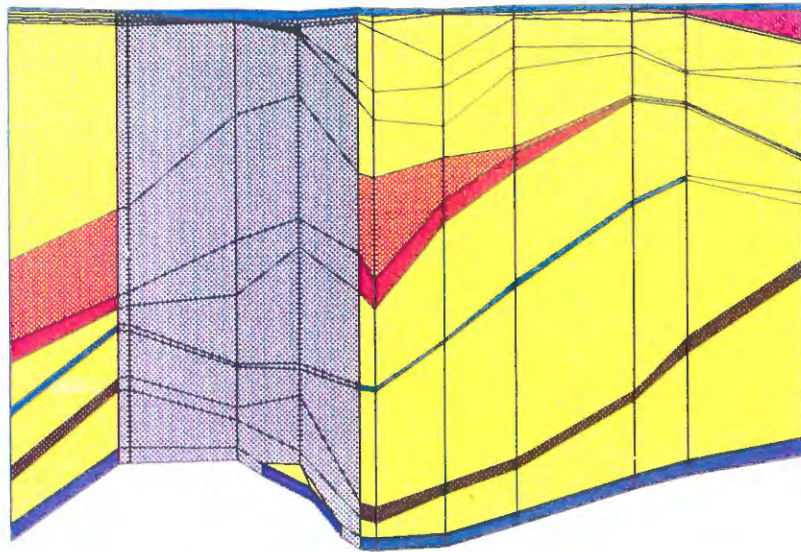


Bild 6:

2D-Modellgitterschnitt (Ost-West-Richtung) durch den südlichen Bereich des Modellendlagers

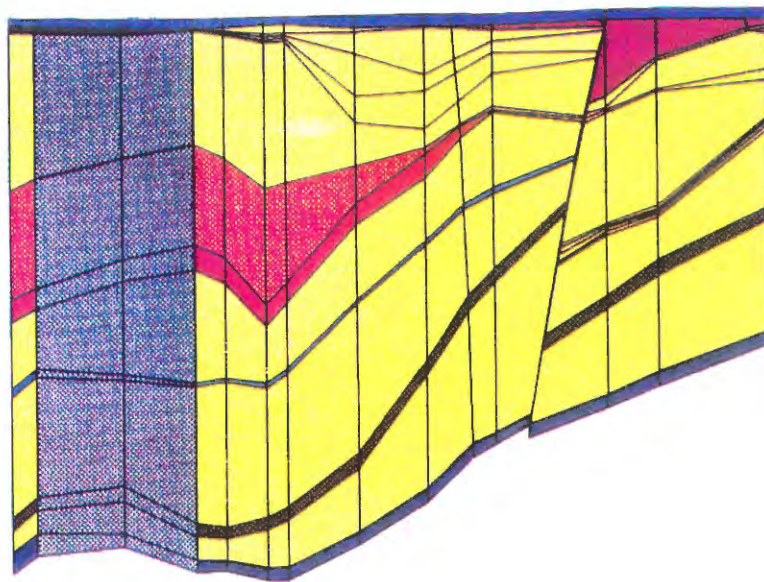


Bild 7:

2D-Modellgitterschnitt (Ost-West-Richtung) durch den nördlichen Bereich des Modellendlagers

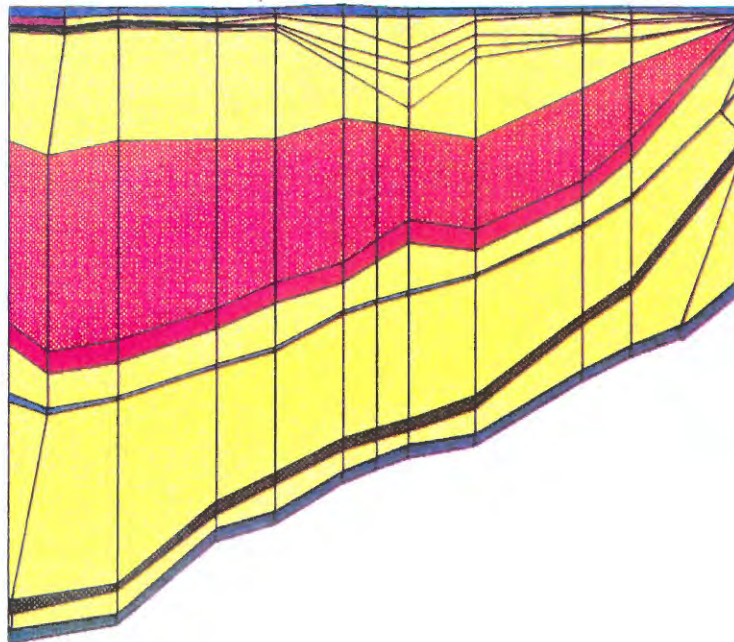


Bild 8:

2D-Modellgitterschnitt (Ost-West-Richtung) durch das Abflußgebiet im Norden des Modellgebietes

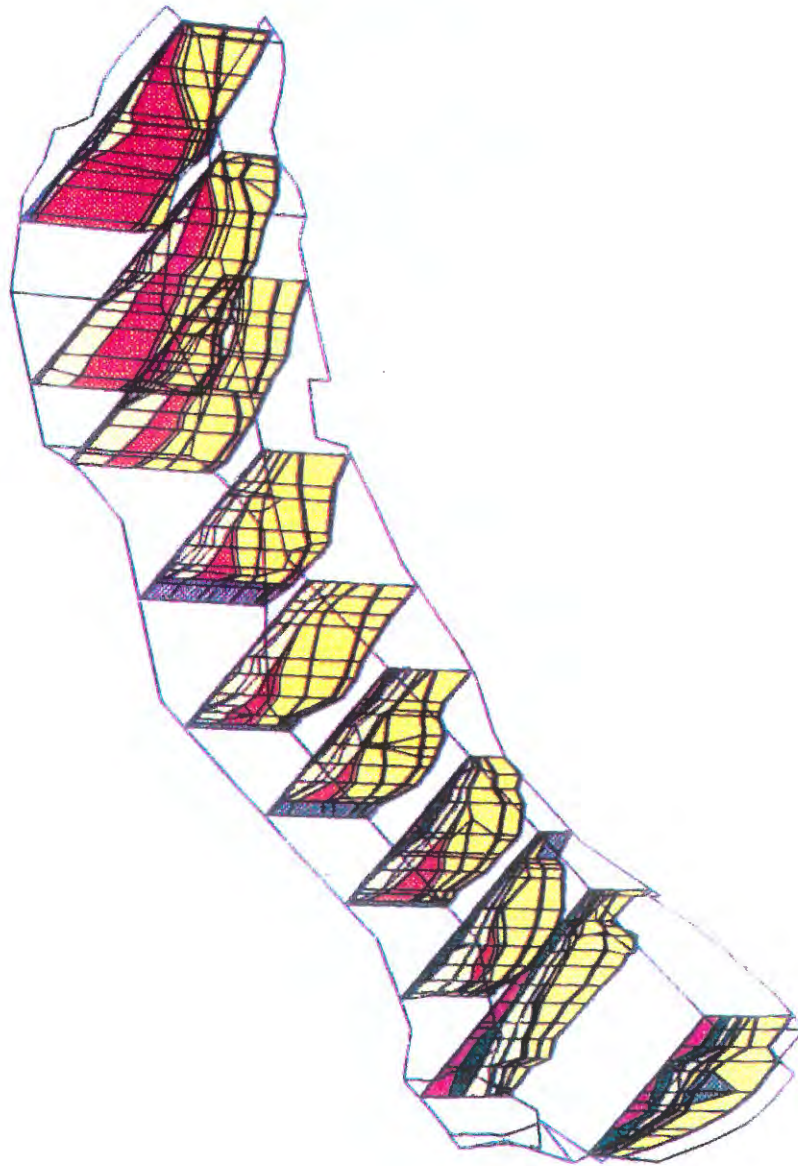


Bild 9:

Aufbau des 3D-Modellgitternetzes durch Zusammenfügen der 2D-Vertikalgitterschnitte



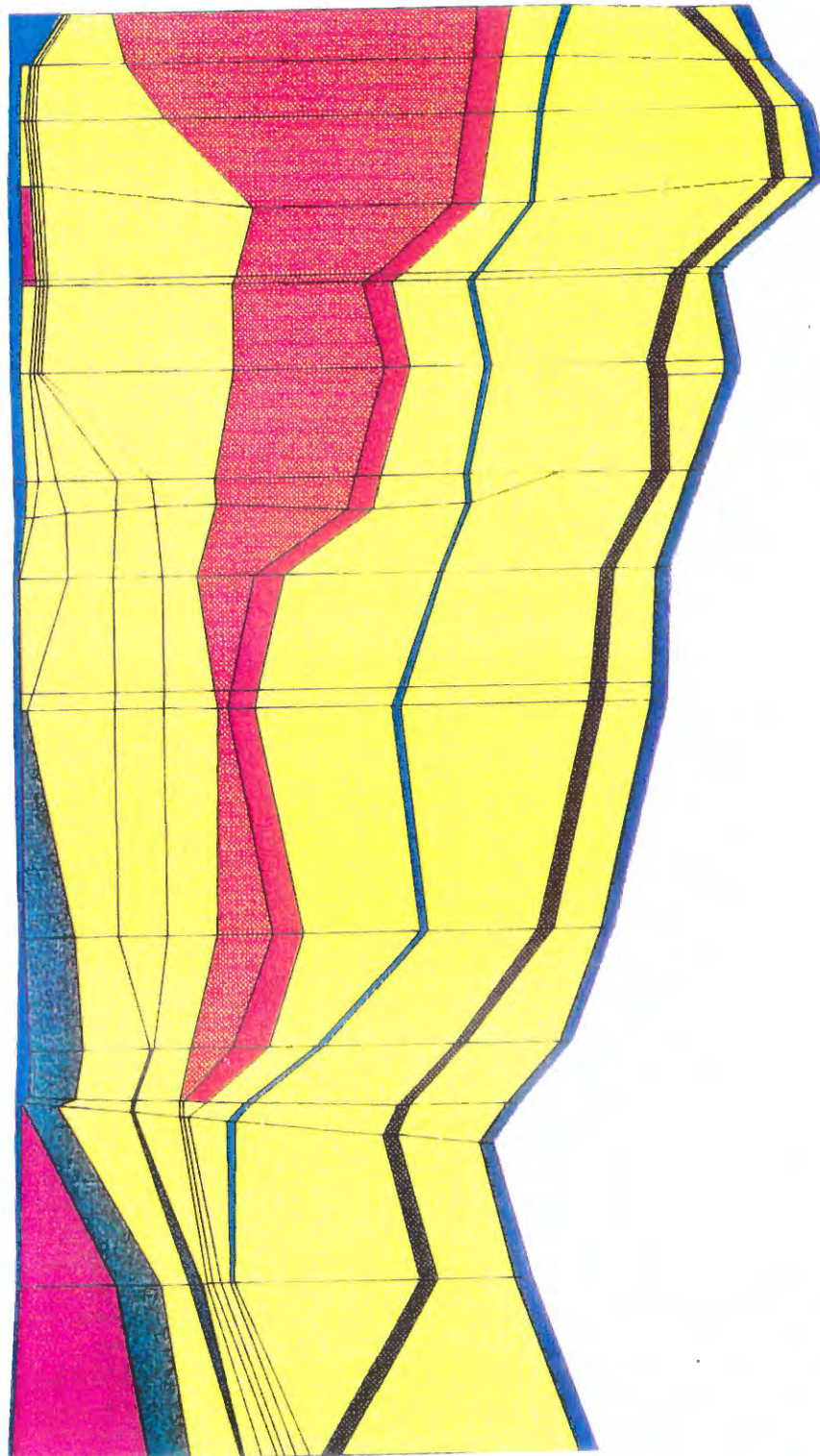


Bild 10:

Nord-Süd-verlaufender Gitterebenesschnitt entlang der Hauptmuldenachse durch das Modellgebiet zur Überprüfung der räumlichen Anbindung der mit NAMMU generierten 2D-Modellgitterschnitte

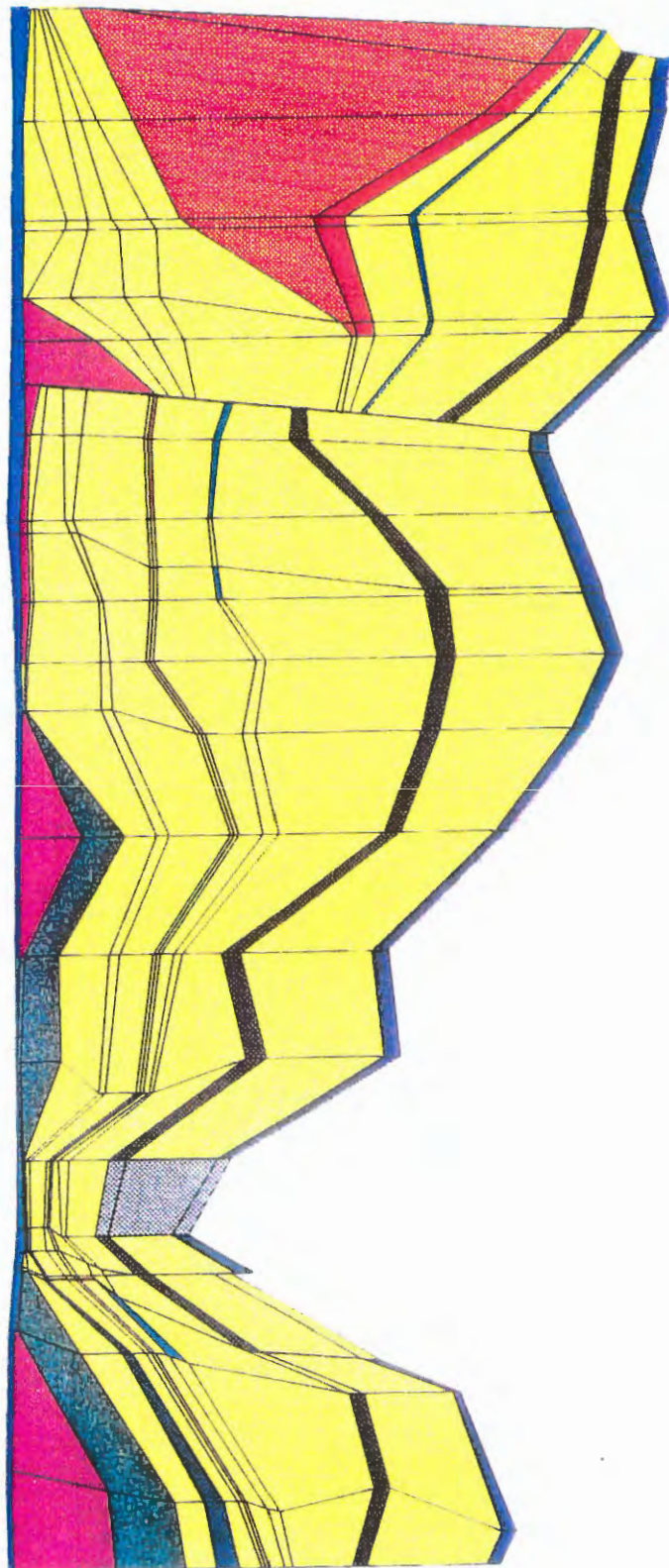


Bild 11:

Nord-Süd-verlaufender Gitterebenesschnitt östlich der Hauptmuldenachse zur Überprüfung der Anbindung der 2D-Modellgitterschnitte

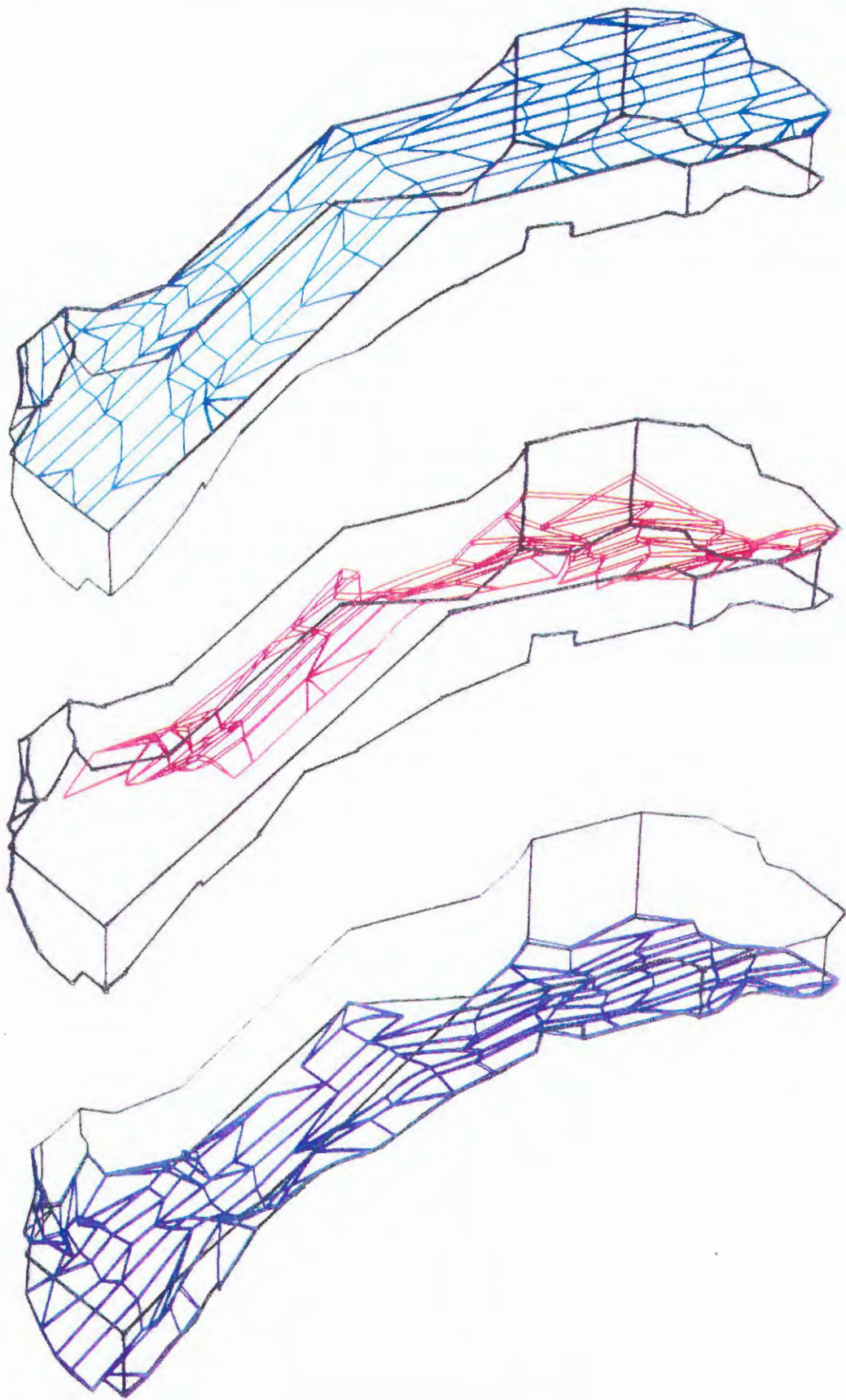
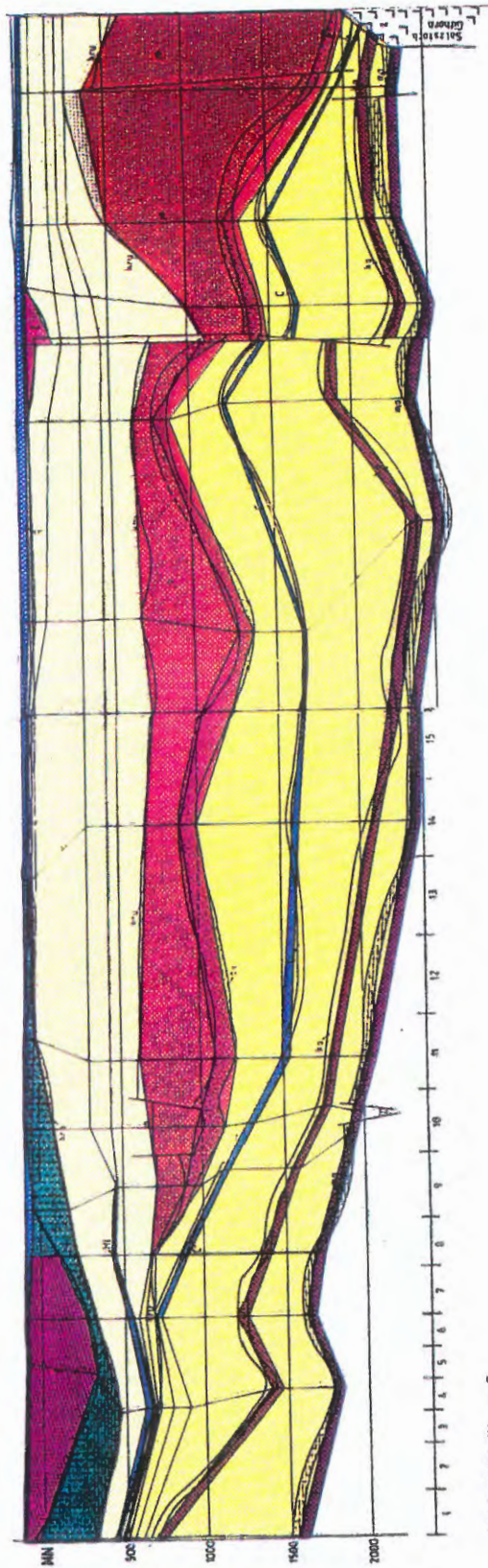


Bild 12a-c:

Topographie des Modellgitternetzes a) Quartär, b) Oxford, c) Oberer Muschelkalk



**Bild 13:**

Umsetzung des hydrogeologischen Modells in das Rechenmodell: Nord-Süd-Schnitt "7"

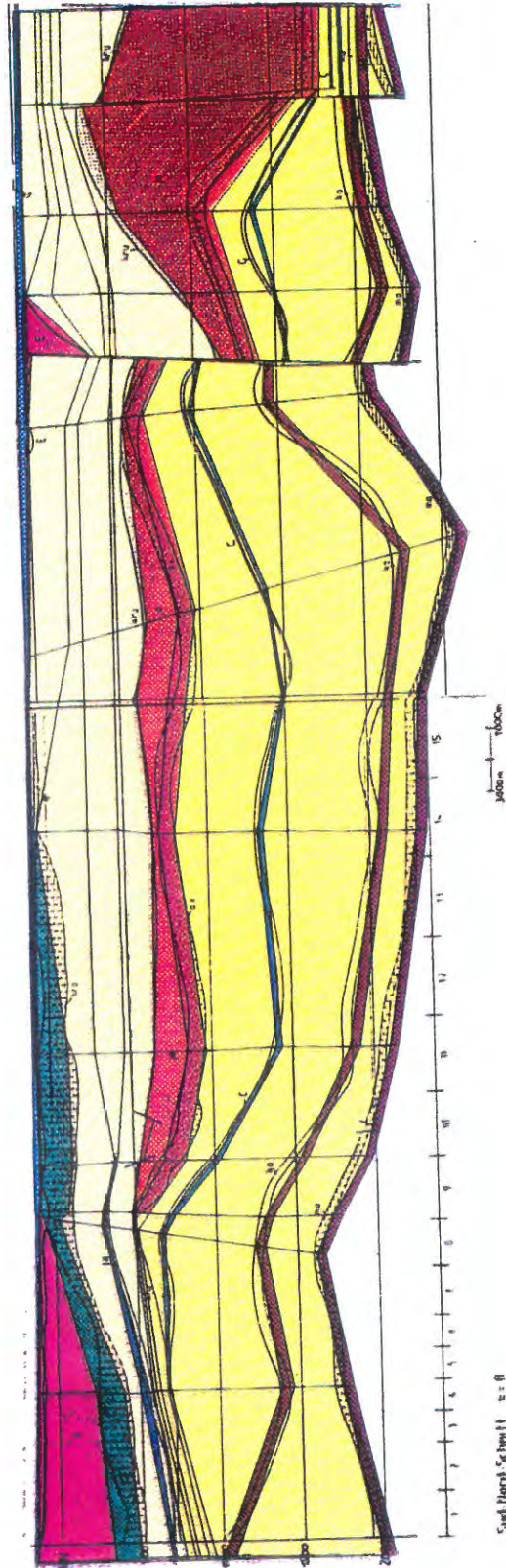


Bild 14:

Umsetzung des hydrogeologischen Modells in das Rechenmodell: Nord-Süd-Schnitt "8"

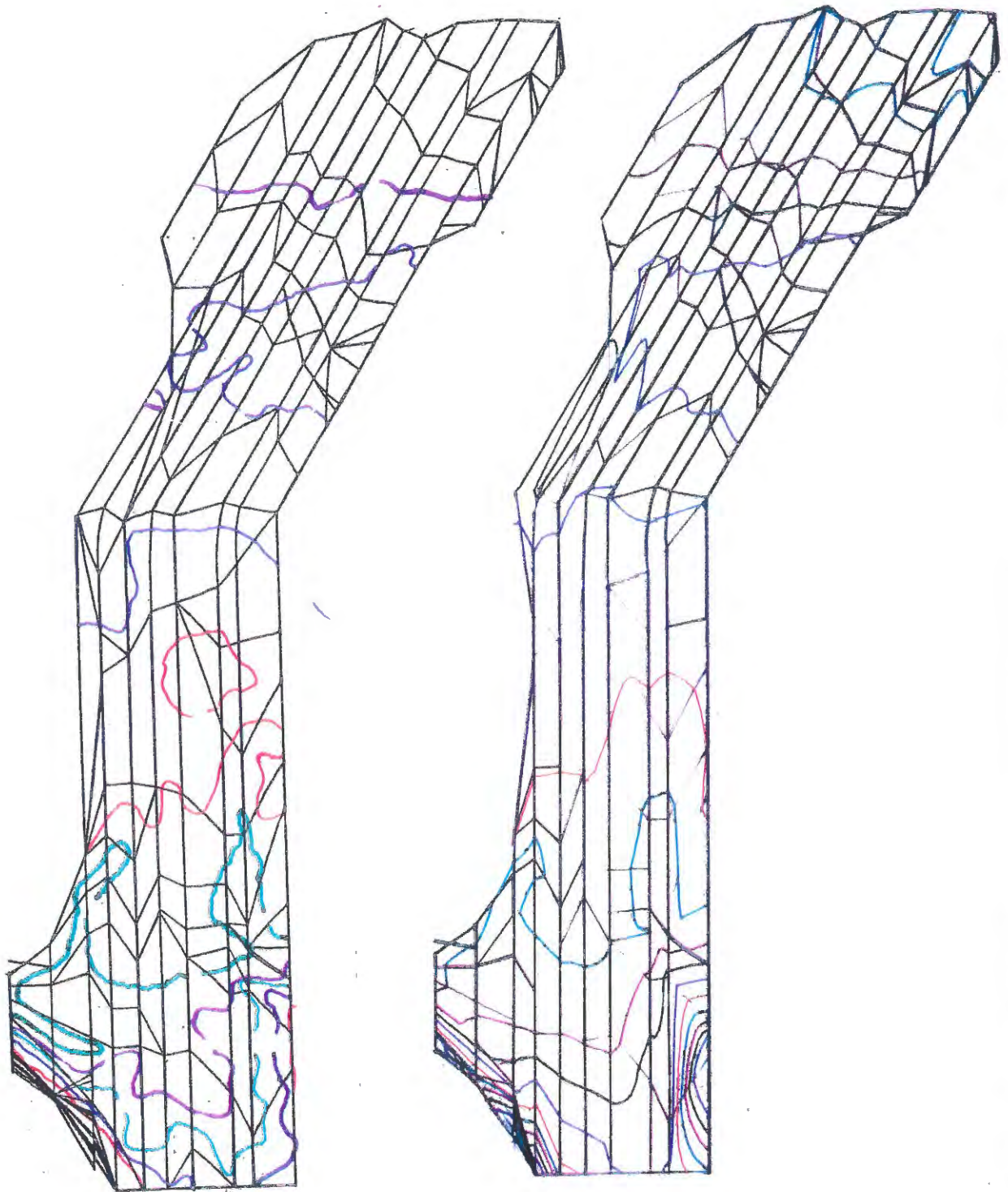


Bild 15:

Vergleich der gemessenen und im Programm ermittelten Potentiallinien im Quartär

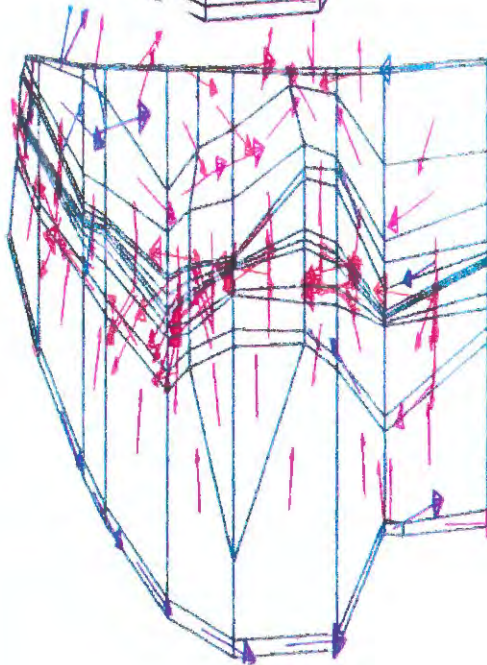
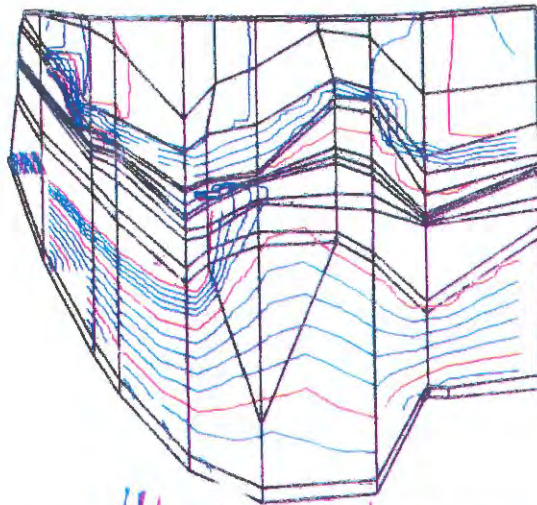
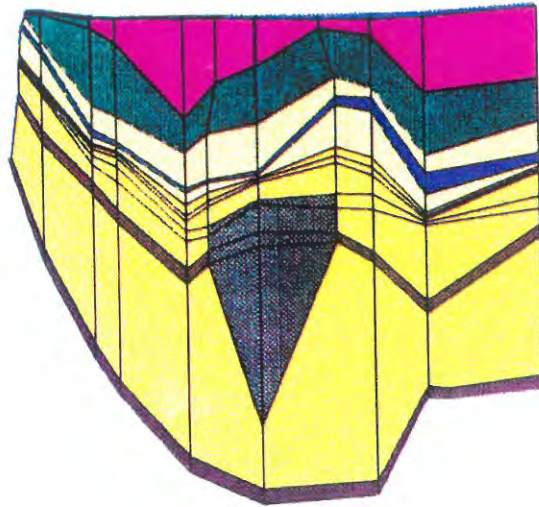


Bild 16a-c:

Ost-West-Modellgitterschnitte durch das Wiederergänzungsgebiet im Süden: a) hydrogeologischer Modellschnitt, b) Grundwasser-Druckpotentialfeld und c) Darcy-Geschwindigkeitsvektorenfeld

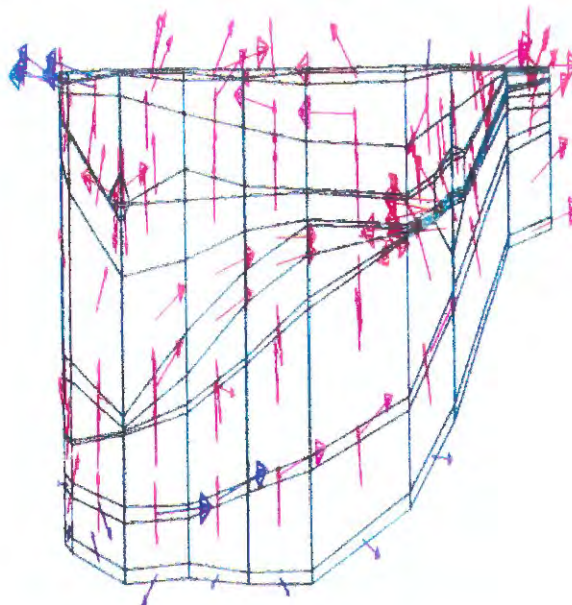
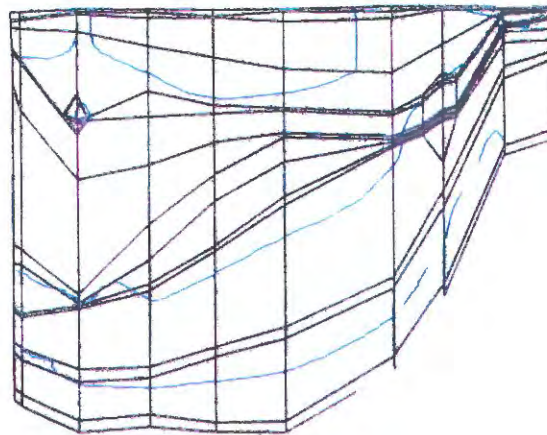
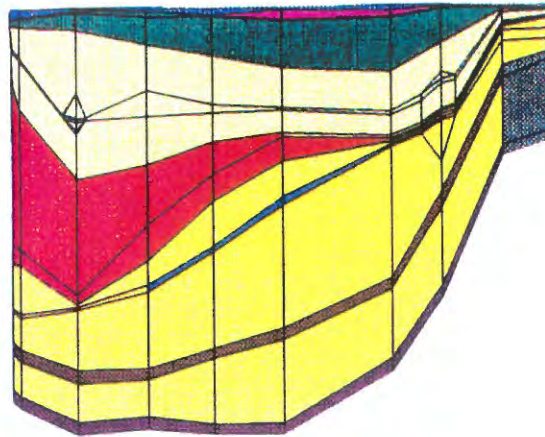


Bild 17a-c:

Ost-West-Modellgitterschnitte im Bereich des Modellendlagers: a) hydrogeologischer Modellschnitt, b) Grundwasser-Druckpotentialfeld und c) Darcy-Geschwindigkeitsvektorenfeld



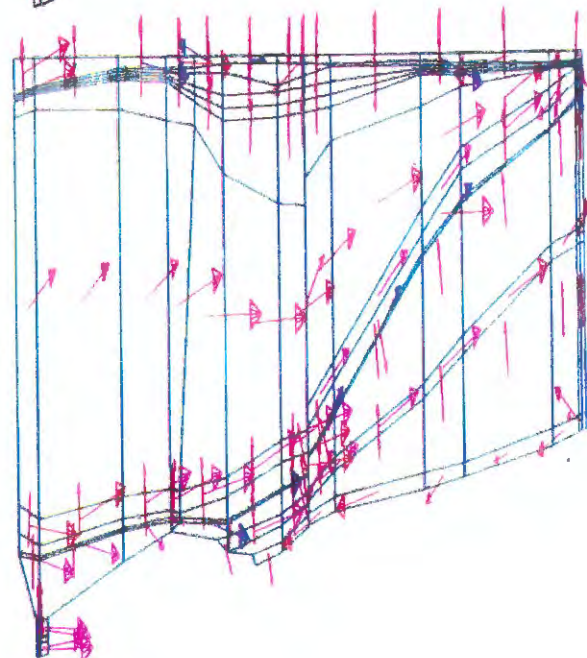
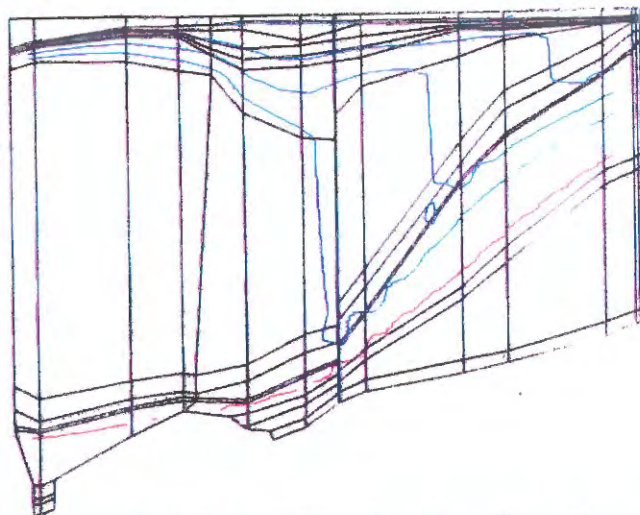
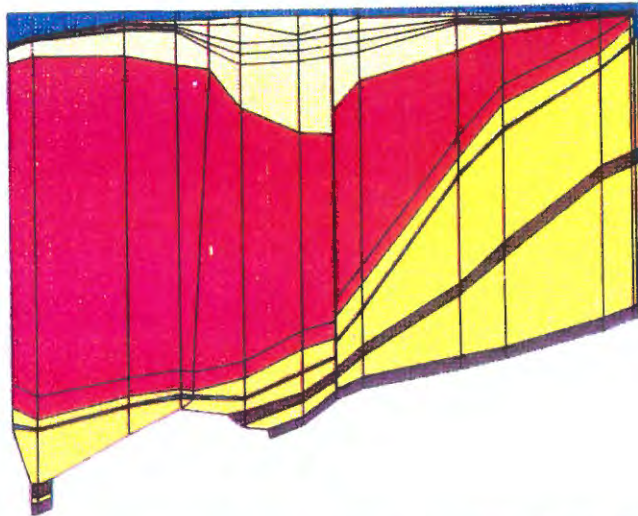


Bild 18a-c:

Ost-West-Modellgitterschnitte durch das Gebiet des Grundwasser-Ausstroms im Norden: a) hydrogeologischer Modellschnitt, b) Grundwasser-Druckpotentialfeld und c) Darcy-Geschwindigkeitsvektorenfeld

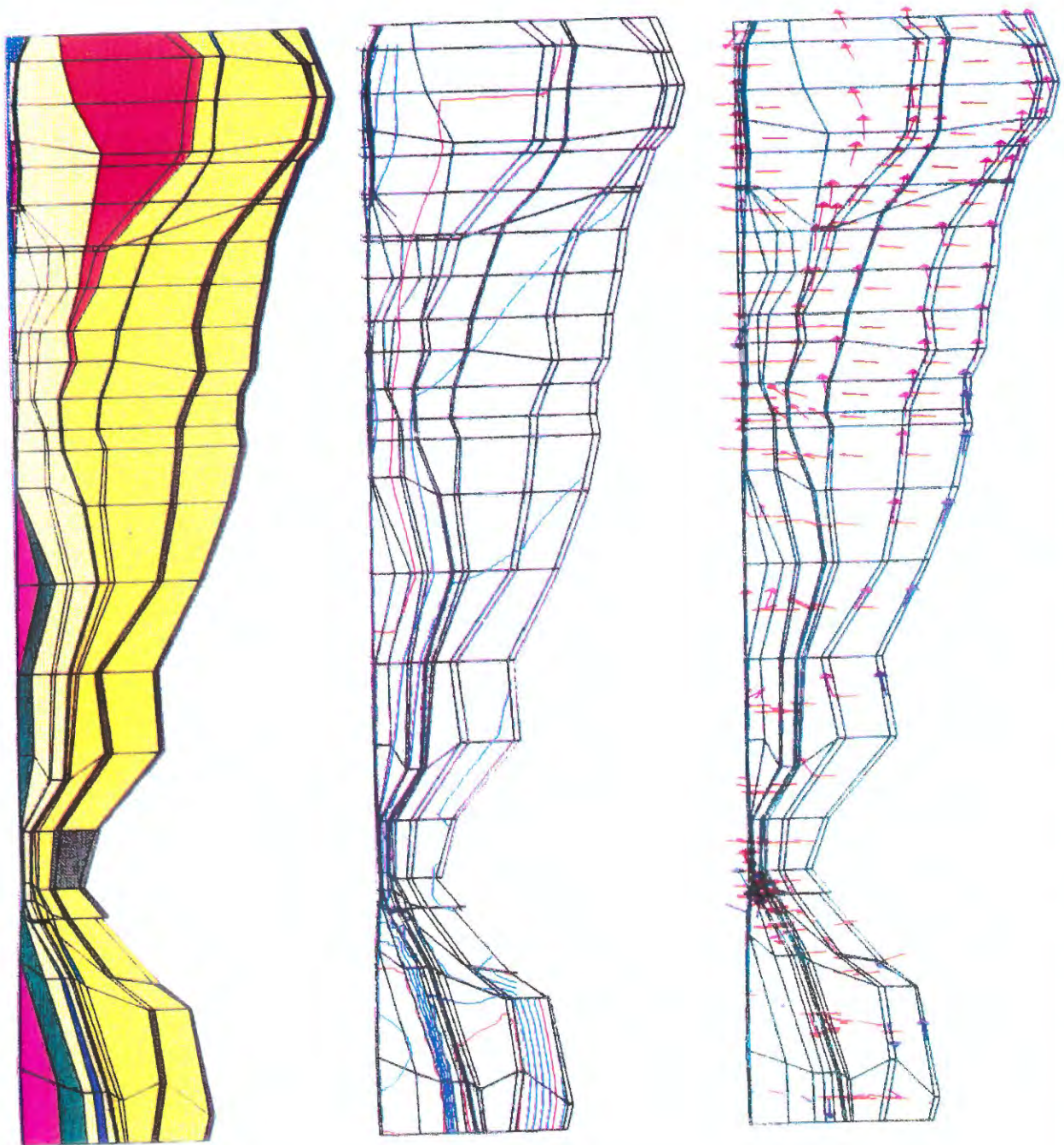


Bild 19a-c:

Nord-Süd-Modellgitterschnitte entlang des östlichen Modellrandes:  
 a) hydrogeologischer Modellschnitt, b) Grundwasser-Druckpotentialfeld  
 und c) Darcy-Geschwindigkeitsvektorenfeld

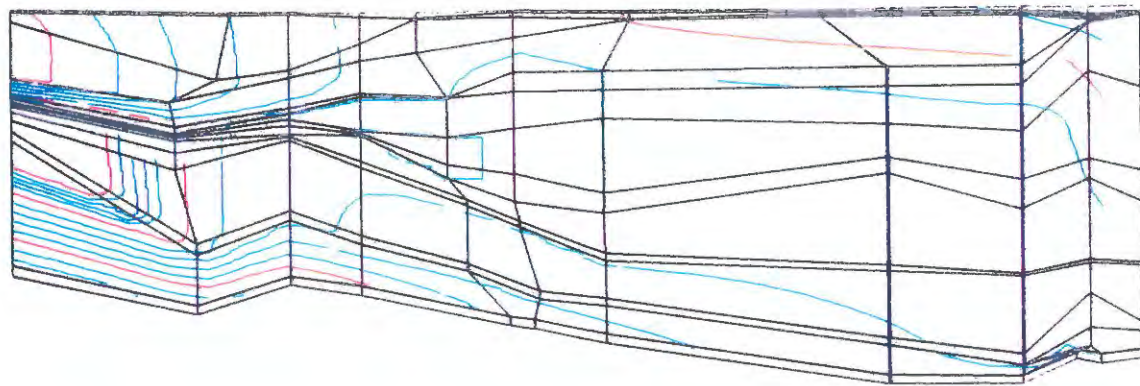


Bild 20:

Nord-Süd-Modellgitterschnitt bei  $X = 5\,000$  m: Grundwasser-Druckprofile

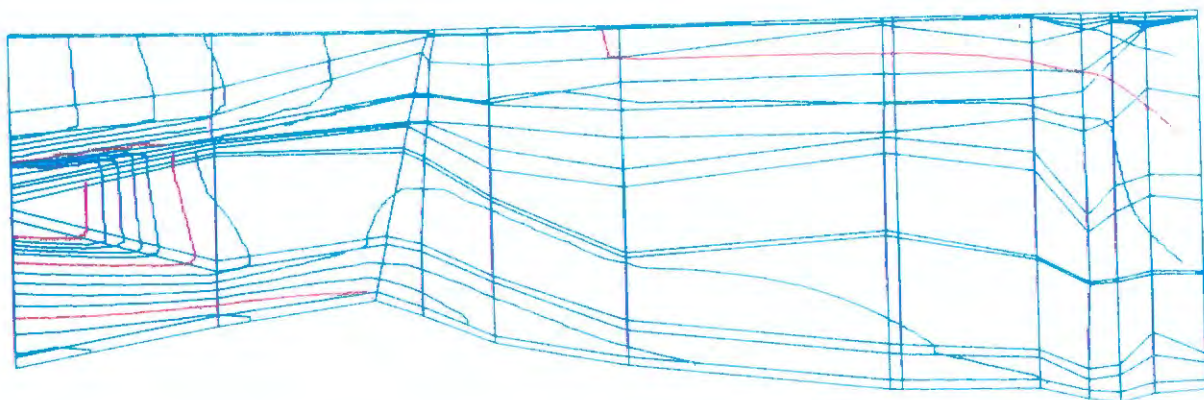


Bild 21:

Nord-Süd-Modellgitterschnitt bei  $x = 6\ 000$  m: Grundwasser-Druckprofile

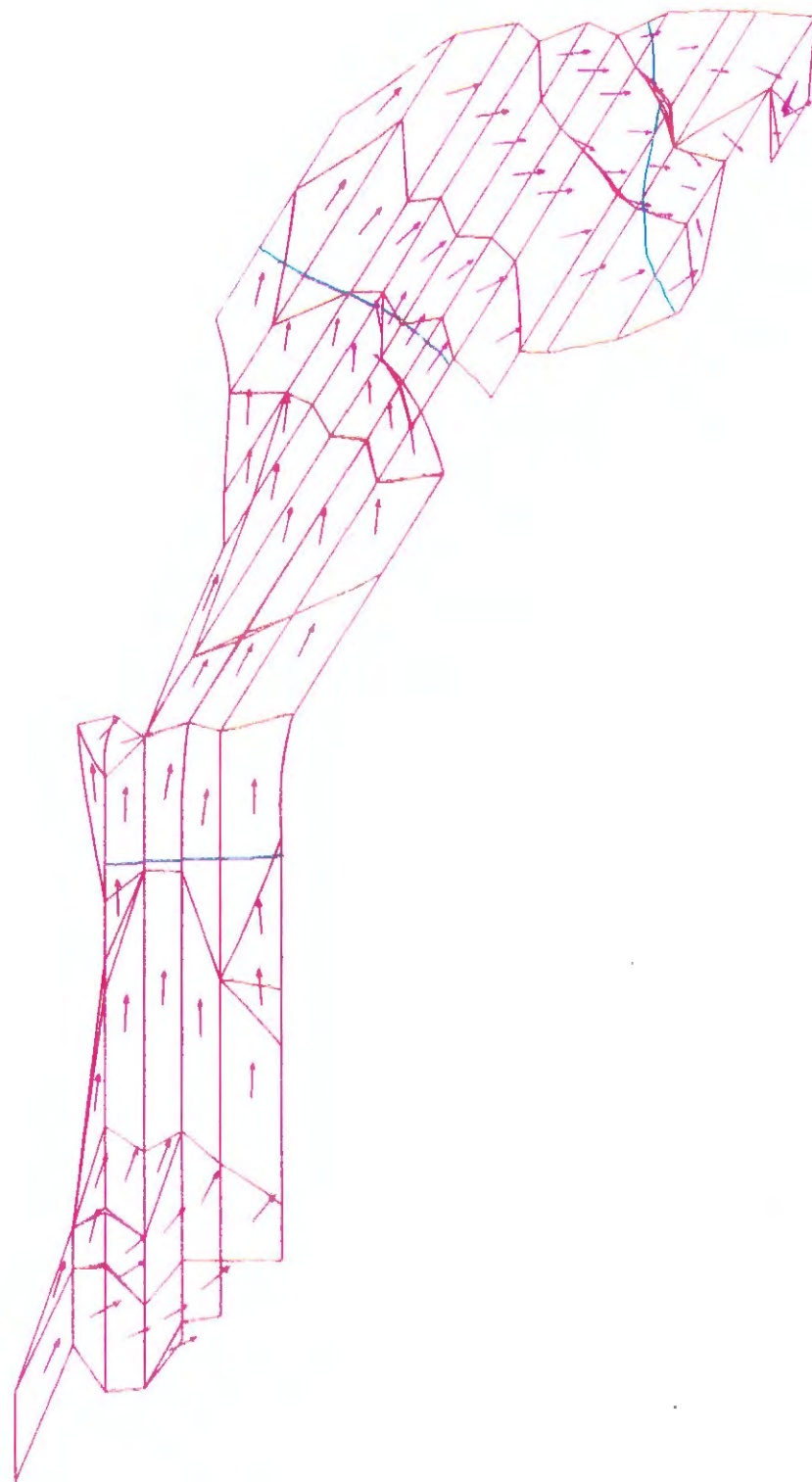


Bild 22:

Projektion der Modellgittertopographie, der Grundwasser-Isopotentiallinien und der Darcy-Geschwindigkeitsvektoren des Oxford auf die horizontale Ebene

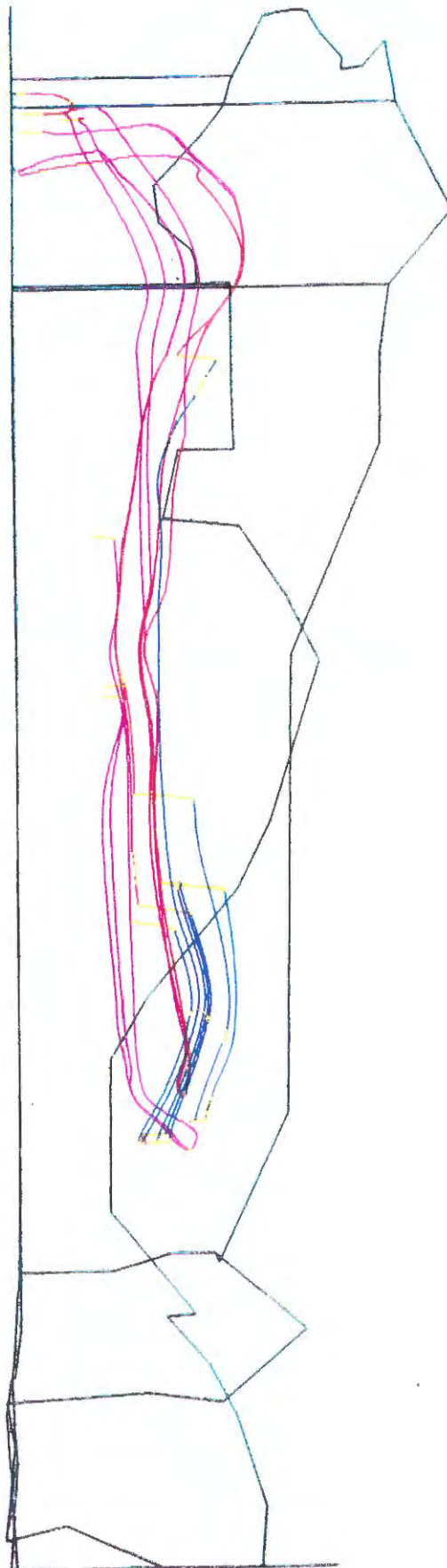


Bild 23a:

Trajektorienberechnung des Basisfalles: Seitenansicht auf das 3D-Modell



Bild 23b:

Trajektorienberechnung des Basisfalles: Aufsicht auf das 3D-Modell



Bild 24:

Trajektorienberechnung der Parametervariante Unterkreide: Seitenansicht des 3D-Modells.



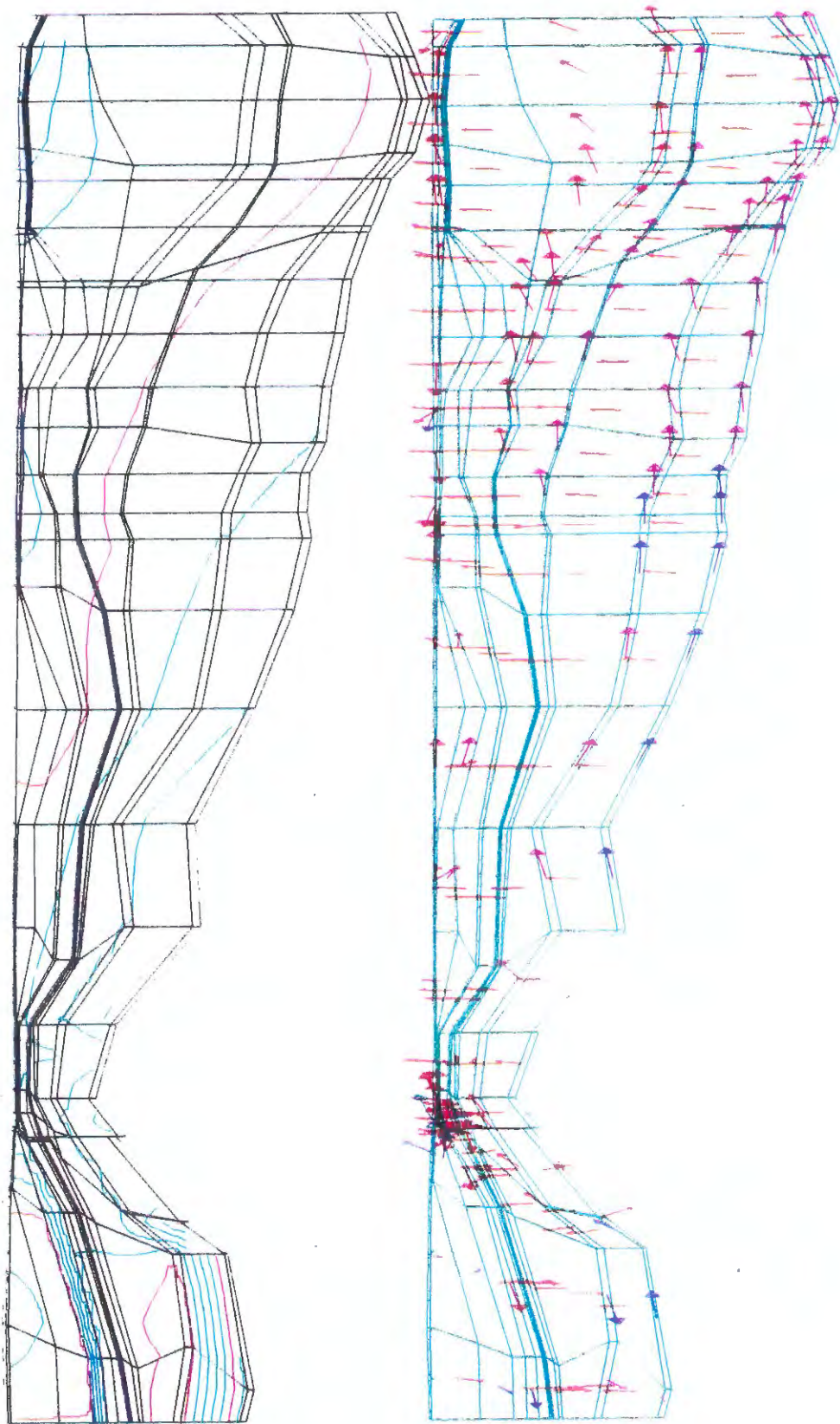


Bild 25:

Nord-Süd-Modellgitterschnitte: Druckprofil und Geschwindigkeitsfeld